

COUPLAGE DES MOUVEMENTS COLLECTIFS ET INDIVIDUELS :

Théories de champ moyen : résultats et développements

H. FLOCARD

Institut de Physique Nucléaire, Orsay

LECON I

L'APPROXIMATION HARTREE-FOCK DEPENDANTE DU TEMPS

1) INTRODUCTION

Si l'on voulait décrire de façon plaisante le statut actuel de la méthode de Hartree-Fock dépendant du temps (TDHF), on pourrait dire qu'elle est entrée au panthéon des outils théoriques de la Physique Nucléaire. Ce disant, on marquerait l'intérêt que l'on doit y porter ; ses résultats, ses techniques constituent un ensemble particulièrement remarquable dans notre discipline, auquel les travaux ultérieurs ne pourront manquer de se référer ou qu'il sera toujours utile de consulter. En même temps, il faut bien reconnaître que, sous sa forme originelle, TDHF a cessé d'être le domaine excitant qu'il fut dans le milieu de la dernière décade. Ses propriétés ainsi ce que l'on doit en attendre sont pour l'essentiel bien compris et les théoriciens nucléaires tournent leurs yeux vers des horizons moins définis mais espèrent-ils plus prometteurs. Cela ne veut pas dire que dans le futur TDHF ne pourra pas être sollicité pour un problème bien précis, oublié jusqu'alors par les physiciens dans leur précipitation à défricher le contenu de la méthode. Pour citer un exemple plus que voisin l'approximation de la phase aléatoire (RPA) malgré son âge canonique continue à rendre des services pour peu qu'elle soit sollicitée de façon originale.

Dans cette première leçon après avoir rappelé comment on pouvait obtenir les équations TDHF. Je ferai une revue de ce qui me semble le plus significatif parmi les résultats qu'on en a dérivés. L'arbitraire de ce genre de sélection est bien connu mais inévitable, Je mentionne en particulier que je n'aborderai pas la question de l'approximation adiabatique à TDHF qui constituerait en elle-même la matière d'un cours tant est grand le nombre de travaux qui y ont été consacrés.

2) DERIVATIONS DE L'EQUATION TDHF

Il existe bien des façons de dériver les équations TDHF. Toutes impliquent une approximation par rapport à l'équation de Schrödinger mais le contenu de cette approximation peut être interprété différemment selon les approches. Il semble en tout cas raisonnable d'affirmer que TDHF constitue le point de passage obligé de toute tentative de réduction du problème à N corps s'attachant à préserver les propriétés d'antisymétrie de la fonction d'onde d'un système de Fermions. C'est bien sur cette situation de dénominateur commun qui assure à TDHF sa position de référence. Dans ce chapitre, j'en dériverai les équations de deux façons différentes.

Comme toujours, en mécanique quantique, nous commençons avec un hamiltonien que nous écrirons en seconde quantification

$$\hat{H} = \sum_{ij} T_{ij} a_i^\dagger a_j + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \tilde{V}_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \quad (1)$$

où le potentiel à deux corps est défini par ses éléments de matrice antisymétrisés*

$$\tilde{V}_{ijkl} = \langle ij | \hat{V} | kl \rangle - \langle ij | \hat{V} | lk \rangle \quad (2)$$

L'objet central de notre étude sera la densité à un corps, valeur moyenne dans l'état exact du système $|\Psi\rangle$ de l'opérateur $a_j^\dagger a_i$.

$$\rho_{ij} = \langle \Psi | a_j^\dagger a_i | \Psi \rangle \quad (3)$$

On voit tout de suite qu'en focalisant notre intérêt sur cet objet nous restreignons énormément la difficulté du problème mais aussi ce que nous pouvons espérer obtenir de sa solution. Par ailleurs, la volonté qui sera la nôtre d'obtenir un système d'équations clos pour la matrice ρ_{ij} ne peut se justifier que par des arguments physiques. Ceux-ci sont bien connus. Il s'agit du remarquable succès du modèle en couche en physique nucléaire qui indique clairement que les propriétés statiques et dynamiques du noyau peuvent être bien décrites par un hamiltonien à un corps pour peu que celui-ci soit bien choisi. TDHF est bien sur une possibilité offerte par la théorie pour ce choix ; la densité à un corps ρ_{ij} et le champ moyen qui lui est associé sont les ingrédients de base de la méthode.

Compte tenu de la présence dans l'hamiltonien d'un potentiel à 2 corps nous avons besoin d'introduire une autre quantité : la densité à deux corps, dont il faudra ultimement nous débarrasser. En fait, il est plus commode d'introduire la notion de cumulant $C_{kl ij}$ par la définition

$$\langle \Psi | a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k | \Psi \rangle = \rho_{ki} \rho_{lj} - \rho_{kj} \rho_{li} + C_{kl ij} \quad (4)$$

Le cumulant mesure donc la déviation de la densité à deux corps (membre de gauche) par rapport à son approximation factorisée, ou comme on dit quelquefois, indépendante. On peut dire de façon équivalente qu'il indique la quantité de corrélations présentes dans $|\Psi\rangle$, ou la violation du théorème de Wick

Après un peu d'algèbre on montre alors que l'équation de Schrödinger $i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\Psi\rangle$ induit pour l'évolution de la matrice densité l'équation suivante

$$i\hbar \frac{d\rho_{ij}}{dt} = \langle \Psi | [a_j^\dagger a_i, \hat{H}] | \Psi \rangle = [h, \rho]_{ij} + \frac{1}{2} \sum_{klm} (\tilde{V}_{imkl} C_{kljm} - C_{imkl} \tilde{V}_{kljm}) \quad (5)$$

où apparaît le champ moyen de Hartree-Fock.

$$h_{ij} = T_{ij} + \sum_{kl} \tilde{V}_{ikjl} \rho_{lk} \quad (6)$$

L'approximation TDHF se formule alors simplement. Elle consiste à négliger dans l'équation (5) les termes où apparaît le cumulant C . L'équation d'évolution TDHF s'écrit donc

$$i\hbar \frac{d\rho}{dt} = [h, \rho] \quad (7)$$

* Les a_i^\dagger et a_j seront dans ce qui suit des opérateurs de création et d'annihilation de Fermions

En physique nucléaire, cette dérivation est toutefois trompeuse. En effet, dans l'équation exacte (5) l'hamiltonien \hat{H} contient une interaction \hat{V} réaliste décrivant par exemple les déphasages de la collision nucléon-nucléon libres. Or le champ moyen h (6) associé à tel potentiel ne correspond absolument pas à celui suggéré par l'expérience. On sait par expérience ¹⁾ que les équations (6) et (7) ne peuvent reproduire les données que si l'interaction \hat{V} est choisie comme une interaction effective (On a bien sûr aussi de bonnes justifications théoriques : la théorie de la matrice G ²⁾). En réquisant l'équation 5, nous avons donc d'un point de vue technique effectué beaucoup plus que l'abandon des corrélations et d'un point de vue physique beaucoup moins car une part des corrélations se trouve incluse dans la définition de l'interaction effective. En fait nous avons changé la nature des nucléons décrits par les opérateurs a_i^\dagger : de libres ils sont devenus "habillés".

Une autre dérivation que je voudrais vous proposer car elle introduira le contenu de la Leçon III utilise le principe variationnel dit de Schrödinger. On introduit une action

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt \langle \Psi | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} | \Psi \rangle \quad (8)$$

dont on peut facilement vérifier que pour les variations les plus générales du vecteur "bra" ; $\langle \delta\Psi |$ elle est stationnaire si la fonction $|\Psi\rangle$ satisfait à l'équation de Schrödinger. TDHF est alors obtenu par une réduction de l'espace variationnel de la fonction Ψ (et un changement concomitant de \hat{V} réaliste en \hat{V} effectif, comme il est mentionné plus haut) à celui des déterminants de Slater. Si l'on note Ψ_α les fonctions d'ondes individuelles qui servent à bâtir Ψ , on montre alors que l'action s'écrit

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3x \mathcal{L} \quad (9)$$

où la densité lagrangienne \mathcal{L} prend la forme *

$$\mathcal{L} = i\hbar \sum_{\alpha=1}^A \Psi_\alpha^* \frac{\partial \Psi_\alpha}{\partial t} - \mathcal{H}(\Psi_\alpha, \Psi_\alpha^*) \quad (10)$$

et $\mathcal{H}(\Psi_\alpha, \Psi_\alpha^*)$ représente une densité d'énergie qui est une fonctionnelle des fonctions d'onde individuelles. Les équations TDHF sont alors les équations de Lagrange associées à cette action soit

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_\alpha}{\partial t} = \mathcal{H} \Psi_\alpha \quad (11)$$

* l'écriture (9) n'est en fait valable que pour un potentiel local. Toutefois les résultats que je vais en déduire sont vrais quelquesoit le potentiel.

où l'hamiltonien de HF introduit par l'équation

$$h\psi_a = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \psi_a^*} \quad (12)$$

correspond à celui défini en 6. Pour se convaincre que l'équation (12) est identique à (7), il suffit de se rappeler que pour un déterminant de Slater la matrice ρ_{ij} est égale à

$$\rho_{ij} = \langle \Psi | a_j^\dagger a_i | \Psi \rangle = \sum_{\alpha=1}^A \langle i | \psi_\alpha \rangle \langle \psi_\alpha | j \rangle$$

On peut alors aisément retrouver l'équation matricielle (7) à partir de (11)

3) SYMETRIES ET INVARIANTS

Afin de décrire correctement des données expérimentales une théorie doit satisfaire à un certain nombre de critères d'invariance associés à des symétries du problème. Par exemple, pour reproduire les résultats de réactions par ions lourds il est souhaitable de disposer d'une théorie satisfaisant aux invariances d'espace. De même pour définir des voies asymptotiques où l'on observe des espèces nucléaires bien définies la conservation du nombre de nucléons est une condition nécessaire. Une des principales qualités de TDHF est justement de satisfaire à beaucoup de critères de symétrie. La façon peut-être la plus simple de le vérifier consiste à remarquer que, écrit sous la forme (9) (10), TDHF devient une théorie classique des champs où les fonctions d'onde Ψ_i et Ψ_i^* jouent le rôle de champs classiques (analogues du potentiel vecteur A_μ de l'électrodynamique classique par exemple). On peut alors trouver tous les invariants d'une telle théorie en appliquant un théorème dit de Noether. Celui-ci montre qu'à toute transformation continue affectant à la fois les coordonnées $(x, t) \rightarrow (x', t')$ et les champs $\Psi_i(x, t) \rightarrow \Psi_i'(x', t')$ qui laisse la densité Lagrangienne invariante :

$\mathcal{L}(\Psi_i'(\vec{x}, t')) = \mathcal{L}(\Psi_i(\vec{x}, t))$ correspond une quantité conservée durant l'évolution. Sans entrer plus en détail dans le contenu du théorème ³⁾ faisons la liste des symétries et des invariants qu'on en dérive.

Associé à l'invariance par translation on trouve la conservation d'une quantité que l'on sait devoir appeler l'impulsion et qui n'est autre que l'intégrale de la somme des courants créés par chacun des nucléons

$$\vec{J} = \frac{1}{2i} \sum_{\alpha=1}^A (\Psi_\alpha^* \vec{\nabla} \Psi_\alpha - \Psi_\alpha \vec{\nabla} \Psi_\alpha^*) \quad (13)$$

la conservation du quadrivecteur associé se traduit alors par l'équation de continuité

$$\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} + \frac{\hbar}{m} \operatorname{div} \vec{J} = 0$$

m'étant la masse du nucléon et $\tilde{\rho}$ la densité spatiale de masse

$$\tilde{\rho}(\vec{x}, t) = \sum_{\alpha=1}^A |\Psi_\alpha(\vec{x}, t)|^2 \quad (14)$$

L'invariance par translation et l'invariance de Galilée sont particulièrement utiles car ce sont elles qui permettent de définir les angles de déflexion et les énergies cinétiques finales des fragments émergeant d'une réaction par ions lourds (même si ceux-ci ne sont plus individuellement des déterminants de Slater). De même l'invariance de jauge et l'invariance unitaire permettent de définir asymptotiquement les nombres de nucléons ainsi que les distributions de masse.

Nature de la transformation continue	Paramètre de la transformation	x', t'	$\Psi'_A(x', t')$	Quantité conservée
Translation spatiale	\vec{r}	$\vec{x} + \vec{r}$ t	$\Psi_A(x, t)$	$\vec{P} = \hbar \int d^3x \vec{j} = m A \vec{V}$ Impulsion
Translation temporelle	$-t$	\vec{x} $t + \tau$	$\Psi_A(x, t)$	$E = \int d^3x \mathcal{H}(\Psi_A)$ Energie
Rotation spatiale	\vec{n}, θ	$\vec{x} + \sin \theta \vec{n} \times \vec{x}$ $+(1 - \cos \theta) \vec{n} \times (\vec{n} \times \vec{x})$ t	$\Psi_A(x, t)$	$\vec{M} = \hbar \int d^3x \vec{x} \times \vec{j}$ Moment angulaire
Invariance Galiléenne	\vec{v}	$\vec{x} - \vec{v} t$ t	$\Psi_A(x, t) \exp(i \frac{1}{2} m \vec{v} (\vec{x} - \vec{v} t))$	$(\vec{R} \cdot \vec{V} t) = \frac{1}{A} \int d^3x (\vec{x} \cdot \vec{p} - \frac{1}{2} m t)$ Vitesse du centre de masse
Transformation de jauge	θ	\vec{x} t	$\exp(i\theta) \Psi_A(\vec{x}, t)$	$n_A = \int d^3x \Psi_A ^2$ Norme des fonctions d'ondes individuelles
Transformation unitaire	θ	\vec{x} t	$\cos \theta \Psi_A + \sin \theta \Psi_A'$ $\cos \theta \Psi_A' - \sin \theta \Psi_A$	$n_{A,p} = \int d^3x \Psi_A^* \Psi_A$ Recouvrement des fonctions d'ondes individuelles

Table 1 : Liste des transformations continues des variables d'espace-temps (x, t) et des fonctions d'ondes individuelles Ψ_A qui laissent invariante la densité Lagrangienne de TDHF. La dernière colonne contient l'invariant associée à la transformation par le théorème de Noether ainsi que le nom que l'usage lui assigne.

4) TDHF : UNE DYNAMIQUE DE GAZ DE FERMIONS QUASI-LIBRES

Il est bon d'évaluer le contenu physique des équations TDHF dans la mesure où cela nous permettra de mieux comprendre l'origine des succès et des échecs concernant la reproduction des données.

Une des méthodes les plus illustratives consiste à observer la transformée de Wigner de la densité $\rho(z, z')$ (z et z' jouent alors le rôle des indices i et j de la définition (3)). Cette transformée $f(z, k)$ qui représente le meilleur équivalent quantique d'une distribution dans l'espace des phases se définit comme suit :

$$f(z, k) = \frac{1}{2\pi} \int e^{ikz'} \rho\left(z + \frac{z'}{2}, z - \frac{z'}{2}\right) dz' \quad (15)$$

Dans la partie inférieure de la figure 1, on a dessiné l'évolution temporelle de cette quantité pour un cas de collision TDHF à une dimension d'un "noyau" avec de la matière nucléaire semi-infinie. Nous allons voir que les caractéristiques essentielles des résultats peuvent se comprendre au moyen d'un modèle simple de gaz de Fermi. Dans la partie supérieure droite de la même figure nous avons schématisé la situation avant la collision, les lignes en trait plein indiquent la limite des régions occupées dans l'espace des phases. La largeur dans la direction d'impulsion est égale à $2k_F$ la distribution étant uniforme dans cet intervalle. La distribution associée au projectile est décalée verticalement du montant de son impulsion cinétique k_i , celle de la matière semi-infinie est centrée autour de $k = 0$. Les lignes en tiret, schématisent les trajectoires d'un nucléon dans les deux milieux. Dans la matière semi-infinie, un nucléon de vitesse $-k$ rebondit sur la surface nucléaire et acquiert la vitesse $+k^*$. Dans le projectile le même phénomène a lieu mais, pour calculer l'impulsion après la collision sur la surface nucléaire, on doit tenir compte de la vitesse de cette dernière, c'est-à-dire celle du projectile (k_i). Ce comportement est caractéristique de celui d'un gaz de Fermions quasi libres car la trajectoire des nucléons dans le volume de la matière nucléaire est non perturbée (libre parcours moyen infini) les seuls changements d'impulsion ayant lieu à la surface. Dès le début de la collision les surfaces à la gauche du projectile et celle de la matière semi-infinie disparaissent. Les nucléons qui trouvent en face d'eux un espace des phases libre vont alors chercher à l'occuper. On peut distinguer trois types de trajectoires. Pour $-k_F + k_i \leq k \leq k_F$, le nucléon traverse l'ancienne frontière (qui a disparue), frappe la surface de droite du projectile et repart avec l'impulsion $-k + 2k_i$. Les nucléons du projectile d'impulsion $k > k_F$ se déplacent librement vers la gauche. Au contraire, les nucléons de la matière semi-infinie d'impulsion $k < -k_F + k_i$ créent un flux en sens inverse aussi longtemps qu'ils ne rencontrent pas la frontière droite de projectile. Cette discussion est illustrée par le dessin de la partie supérieure droite de la figure dont on voit qu'il correspond bien au résultat TDHF pour $t \leq 8.10^{-22}$ s. Une fois que le flux de nucléons atteint la surface droite du projectile la situation devient plus complexe. On constate qu'à la fin de la collision la nouvelle surface de la matière nucléaire est décalée d'environ 3 fm par rapport à l'ancienne. De même on observe les limites de l'approximation d'un mouvement libre des nucléons dans la matière nucléaire. Par exemple, au dernier temps considéré dans ce calcul, l'impulsion maximale des nucléons est supérieure à celle qui était disponible avant la collision (celle-ci est indiquée par une flèche à la partie supérieure de l'axe des k).

* Pour la cohérence du signe de k et de l'évolution décrite, la direction de l'axe z devrait être renversée sur la figure 1.

Il y a donc accélération de certains nucléons par le potentiel moyen lors du passage du projectile dans la matière semi-infinie. Cependant, malgré des déviations comme celle-ci, on constate que pour l'essentiel la dynamique TDHF est proche de celle d'un gaz de fermions libres.

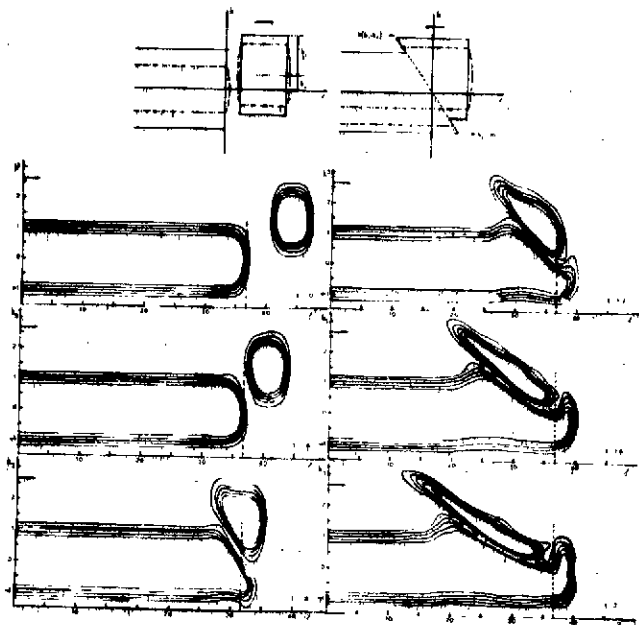


Figure 1 : Lignes de niveaux de la densité dans l'espace des phases pour la collision d'un projectile sur de la matière nucléaire semi-infinie. Les temps sont donnés en unités 10^{-22} s, les distances en fm et les moments en fm^{-1} .

5) RESULTATS TDHF POUR LES COLLISIONS D'IONS LOURDS

TDHF étant une théorie particulièrement appropriée à l'étude des mouvements collectifs de grande amplitude, on pouvait s'attendre à ce que la plupart des calculs soient consacrés à l'étude des collisions d'ions lourds.⁴⁾ Le produit immédiat de la théorie est alors cet ensemble d'images (voir figure 2) voire même de films qui en plus du plaisir esthétique qu'ils donnent, informe sur le mélange complexe de processus d'excitation à divers instants d'une collision. Ces images montrent clairement l'importance des modes collectifs dans le phénomène de transfert d'énergie pendant une collision profondément inélastique. Bien que dans ce qui suit, je m'attacherai exclusivement à l'analyse des résultats numériques, je continue à penser que l'apport de cette production pictographique de TDHF est loin d'être négligeable. Dans une situation aussi confuse que celle à laquelle les résultats des réactions par ions lourds nous confrontent, une analyse des images TDHF pourrait servir par exemple de guide dans le choix des paramètres collectifs utiles.

A partir de l'ensemble des résultats numériques disponibles, nous pouvons nous faire une idée assez claire de ce que TDHF peut ou ne peut pas reproduire dans le domaine des réactions par ions lourds. En effet, durant les cinq à six années d'existence opérationnelle de TDHF, on a étudié un ensemble de couples cible-projectile couvrant relativement bien la table des éléments. Dans la table 2 se trouve la liste de systèmes entre le plus léger $\alpha + \alpha$ et le plus lourd $^{238}\text{U} + ^{238}\text{U}$ pour lesquels un calcul TDHF a été réalisé. En fait il est plus juste de dire que ces résultats ne nous informent que sur la dépendance moyenne en N et Z des résultats TDHF. En effet, beaucoup des caractères spécifiques d'un noyau donné sont amoindris par l'utilisation systématique de l'approximation de remplissage partiel. Celle-ci consiste à décrire les noyaux du milieu de la couche en supposant une occupation partielle de toutes les orbites de la couche

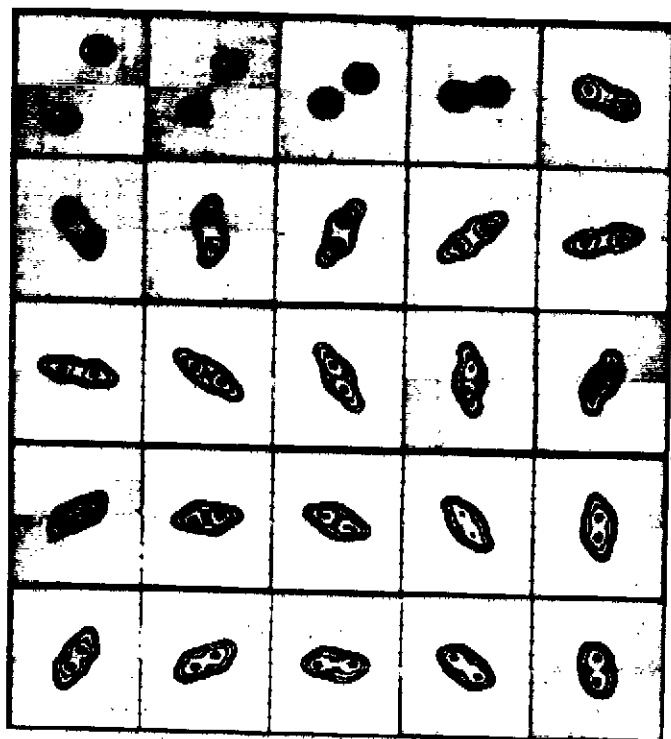


Figure 2 : Lignes de niveau de la densité nucléaire dans le plan de collision à divers instants d'une collision $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$ les temps sont donnés en unités 10^{-22}s .

de valence. En quelque sorte, cette approximation remplace les noyaux véritables par des ersatzs quasi-magiques de même charge et masse. Ces systèmes d'ions lourds ont par ailleurs été étudiés pour des énergies comprises entre la barrière de Coulomb et plusieurs MeV par nucléon (jusqu'à 10 MeV). Ce domaine d'énergie couvre celui pour lequel est valide le modèle sous-jacent à TDHF c'est-à-dire de nucléons libres se déplaçant dans un puits de potentiel dépendant du temps,

$^4\text{He}+^4\text{He}-^{12}\text{C}+^{14}\text{N}-^{12}\text{C}+^{16}\text{O}-^{12}\text{C}+^{18}\text{O}-^{16}\text{O}-^{16}\text{O}+^{24}\text{Mg}$
$^{16}\text{O}+^{27}\text{Al}-^4\text{He}+^{40}\text{Ca}-^{16}\text{O}+^{40}\text{Ca}-^{28}\text{Si}+^{28}\text{Si}-^{20}\text{Ne}+^{58}\text{Ni}-^{40}\text{Ca}+^{40}\text{Ca}$
$^{40}\text{Ar}+^{58}\text{Ni}-^{16}\text{O}+^{93}\text{Nb}-^{12}\text{C}+^{198}\text{Au}-^{86}\text{Kr}+^{139}\text{La}-^{118}\text{Pb}+^{118}\text{Pb}-^{86}\text{Kr}+^{166}\text{Er}$
$^{40}\text{Ca}+^{208}\text{Pb}-^{48}\text{Ca}+^{208}\text{Pb}-^{64}\text{Ni}+^{208}\text{Pb}-^{84}\text{Kr}+^{209}\text{Bi}-^{136}\text{Xe}+^{209}\text{Bi}-^{208}\text{Pb}+^{208}\text{Pb}-^{238}\text{U}+^{238}\text{U}$

Table 2 : Ensemble des couples projectiles cibles pour lesquels un calcul TDHF est disponible. L'ordre choisi est celui des masses croissantes du système composé. Remarquer l'intervalle entre la masse 109 ($^{16}\text{O}+^{93}\text{Nb}$) et 210.

Cette approximation suppose la quasi absence de collisions nucléon-nucléon dans la mer de Fermi. Or une estimation montre que pour des vitesses relatives de quelques MeV par nucléon le principe de Pauli supprime efficacement les collisions entre nucléons allongeant ainsi leur libre parcours moyen.

Comme TDHF restreint son étude à celle de l'évolution de la densité à un corps, on ne peut en principe en extraire des sections efficaces. On dit généralement que TDHF est adapté à la description qualitative de la voie de sortie dominante d'une réaction donnée. Néanmoins, pour la plupart des systèmes de la table 2 nous disposons de calculs de sections efficaces de fusion et ce, même quand la fusion n'est pas le processus dominant. Ceci découle du choix d'une définition opérationnelle simple des événements de fusion : ceux pour lesquels les deux systèmes participants restent en contact durant au moins une rotation. Ceci suppose (en accord en cela avec la majorité des modèles) que le temps nécessaire à une rotation complète du système est suffisant pour que toute influence de la voie d'entrée soit oubliée. C'est certainement une approximation correcte pour les systèmes légers car la répulsion coulombienne est faible. Elle est certainement moins bonne dans les systèmes lourds pour lesquels les effets coulombiens compensent bien l'attraction nucléaire et peuvent empêcher de grands transferts de masse et d'énergie pendant de "longs" intervalles de temps (de l'ordre de 10^{-21} s). Dans de tels cas la définition choisie pour un événement de fusion conduira à une surestimation de la section efficace de fusion par inclusion de phénomènes qu'il vaudrait mieux appeler quasi-élastiques. Pour cette raison, j'insisterai plus sur les prédictions TDHF concernant les systèmes légers. Sur la figure 3, on peut voir, en fonction de l'énergie de bombardement, une comparaison des sections efficaces de fusion TDHF et expérimentales

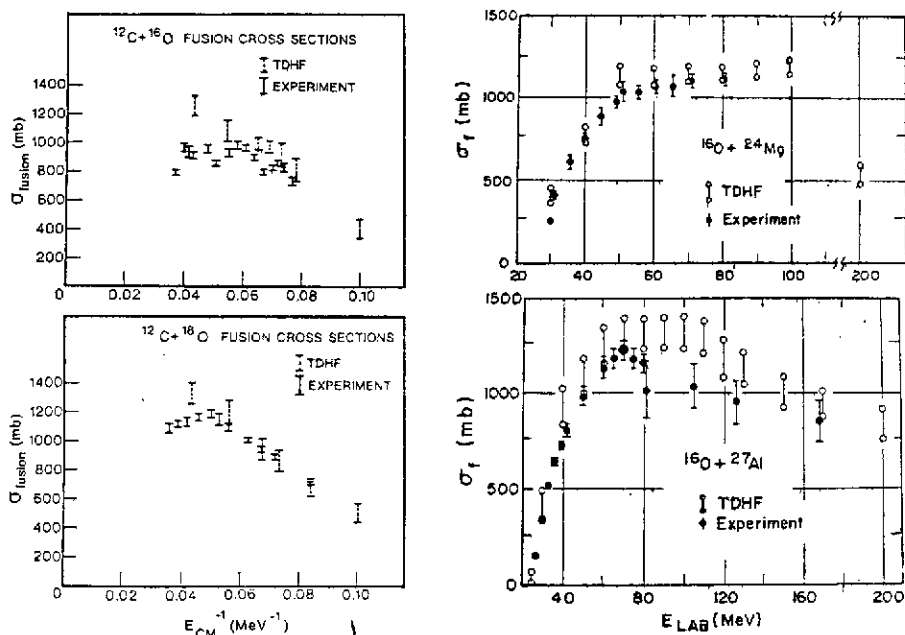


Figure 3 : Section efficaces de fusion expérimentales et calculées pour quatre systèmes d'ions lourds.

tales pour quatre systèmes. L'accord est bon. On peut distinguer trois régimes dans les résultats TDHF. Juste au-dessus de la barrière coulombienne un accroissement de la section efficace appelé couramment régime de barrière. Pour des énergies croissantes, de plus en plus d'ondes partielles franchissent la barrière coulombienne, toutes donnant lieu à un événement de fusion. Ensuite

apparaît, dans la section efficace, un plateau dont nous expliquerons, plus loin, l'origine. Finalement, pour l'énergie la plus haute qui ait été étudiée (système $^{16}\text{O}+^{24}\text{Mg}$) le résultat du calcul indique une forte décroissance qui pourrait s'assimiler au comportement en E^{-1} que l'on dénomme régime du moment angulaire critique. On dispose de peu de résultats pour les systèmes de masse intermédiaire. La comparaison pour $^{16}\text{O}+^{93}\text{Nb}$ à $E_{\text{lab}} = 204$ MeV fournit un accord un peu embarrassant : 1375 mb calculé pour 1350 mesurés. Le système lourd $^{36}\text{Kr}+^{139}\text{La}$ a été étudié à deux énergies $E_{\text{lab}} = 510$ MeV et 710 MeV. Les résultats sont indiqués dans la table 3. Ils sont relativement bons surtout si l'on garde en mémoire le fait que TDHF n'est probablement pas particulièrement adapté pour l'étude d'une voie de sortie qui est loin d'être prédominante.

E_{lab} (MeV)	σ_f (expt) (mb)		σ_f (TDHF) (mb)	
505	170	50	201	55
710	170	50	89	15

Table 3 - Résultats pour la section efficace de fusion de système $^{36}\text{Kr}+^{139}\text{La}$ à deux énergies de bombardement.

Nous avons déjà mentionné que TDHF n'est pas adapté à l'étude de sections efficaces pour des voies bien définies. On peut toutefois constater que les expériences actuelles ne s'y attachent pas trop non plus. Comme la quantité d'énergie transférée dans une collision est généralement beaucoup plus grande que l'interdistance des niveaux d'énergie des noyaux participants, on ne peut espérer obtenir une information détaillée sur les résultats de la réaction. Les résultats se prêtent mieux à une analyse classique et statistique. Une des façons les plus usitées de les présenter est le diagramme de Wilczynski sur lequel on porte les lignes de niveau de la section efficace différentielle dans un plan dont les abscisses mesurent l'énergie cinétique finale des fragments sortants et les ordonnées l'angle de déflexion. Sur un tel graphique, TDHF assigne un point à chaque valeur du moment angulaire ; soit une courbe pour l'ensemble du calcul. Le meilleur résultat que l'on puisse espérer est que cette courbe suive la ligne de crête de la surface de section efficace. Sur la figure 4, on montre une telle comparaison pour quatre systèmes. L'accord est plutôt bon sauf pour $^{36}\text{Kr}+^{139}\text{La}$ où l'énergie perdue dans la collision est sous-estimée. Cependant, une analyse du calcul montre que ce désaccord pourrait être dû à des restrictions de symétrie imposées dans la résolution numérique. En fait, il serait aussi intéressant d'étudier l'influence de l'interaction nucléon-nucléon bien que des résultats préliminaires ne semblent pas indiquer d'effets dramatiques. Dans la partie supérieure de la figure 5 on trouve la même information pour trois réactions induites par des ions Kr. La partie médiane de la figure, nous renseigne sur la quantité ΔA de nucléons transférés ainsi que sur la largeur de la distribution de masse \bar{A} . En dépit d'un éparpillement des points, on constate qu'en moyenne ΔA augmente quand le moment angulaire décroît (collisions plus inélastiques) indiquant que le système léger accroit sa masse. Ceci est en accord qualitatif avec la tendance expérimentale mais non quantitatif puisque la valeur la plus probable de la masse du fragment léger pour un angle de déflexion $\theta = 85$ est calculée égale à 90 alors que l'expérience donne 110. La largeur de la distribution de masse augmente aussi pour les collisions très inélastiques. Sa valeur évolue bien comme le carré du temps contact ainsi qu'il est prédit dans les modèles de diffusion. La largeur reste toutefois un ordre de grandeur inférieure à la valeur expérimentale.

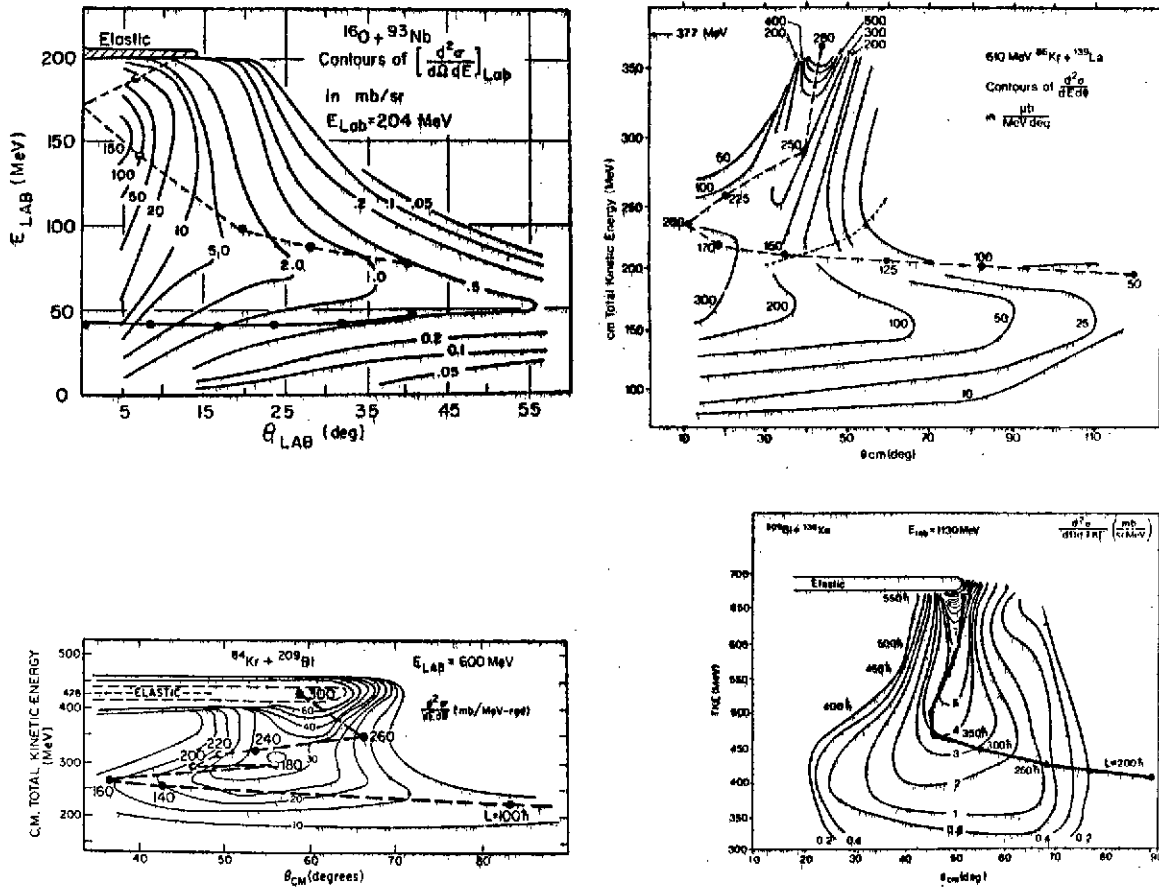


Figure 4 : Résultats TDHF comparés aux données expérimentales pour quatre systèmes d'ions lourds. Les valeurs calculées sont reliées par des lignes continues ou en tirets. Les points sont indexés par la valeur du moment angulaire associé. Pour le système $^{16}\text{O} + ^{93}\text{Nb}$ les points correspondants au moment angulaire plus grand que ceux de la fenêtre de fusion sont reliés par une courbe en tirets, ceux qui correspondent à des moments angulaires plus bas sont reliés par une ligne en trait plein.

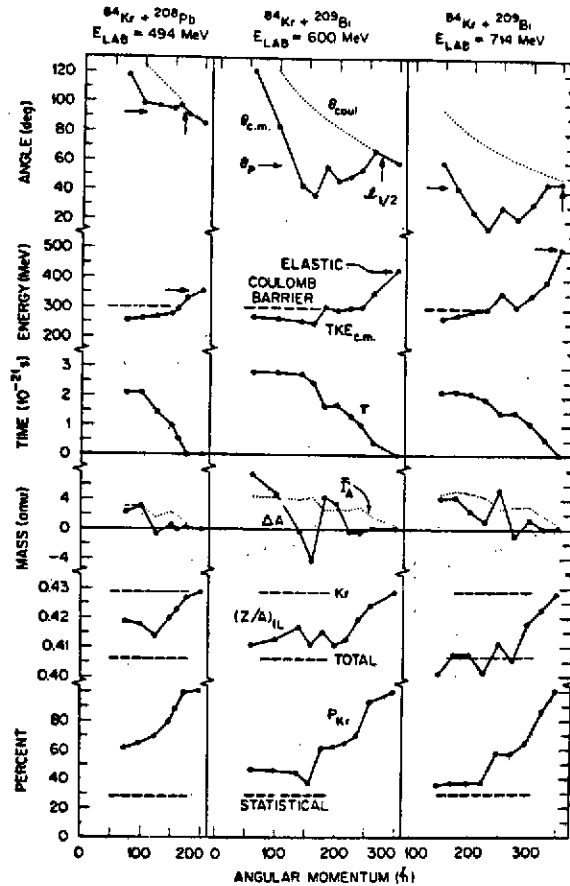


Figure 5 : Résultats TDHF pour trois réactions induites par des ions Kr. De haut en bas et pour chaque système on a porté en fonction du moment angulaire orbital initial l'angle de déflexion dans le repère du centre de masse : θ_{CM} l'énergie cinétique totale finale dans ce repère : TKE_{CM} , le temps de contact : τ , le changement de masse moyen ΔA du fragment léger, la largeur à mi-hauteur de la distribution de masse T_A , le rapport Z/A final dans le fragment léger et le pourcentage d'orbitales de Kr restant dans le fragment léger après la collision.

Ceci met en évidence ce qui est de mon point de vue la déficience la plus notable de TDHF. De plus il n'y a pas d'espoir que ce désaccord puisse être résorbé. En effet, il existe une limite maximum absolue à la largeur de distribution de masse. Celle-ci est imposée par la nature de l'approximation TDHF et dans de nombreux cas la valeur expérimentale excède cette limite.

Cette rapide revue qui ne peut bien sûr rendre justice au remarquable travail accompli, a j'espère néanmoins montré que l'approximation TDHF reproduit avec une précision raisonnable, une catégorie de données, pour un nombre important de systèmes répartis sur la table des éléments et ceci dans l'intervalle d'énergie qui constituait à priori le domaine de validité de la théorie. Par ailleurs, les problèmes majeurs de TDHF concernant la mauvaise prédiction des dispersions apparaissent intrinsèques à l'approximation et ne seront pas résolus par l'utilisation d'une meilleure interaction ou la levée des dernières symétries encore imposées même par les calculs les plus élaborés.

Avant de quitter le domaine des ions lourds je voudrais discuter deux phénomènes qui bien qu'ayant peu conduit à des comparaisons avec l'expérience sont à mon sens intéressants parce que caractéristiques de TDHF. Le premier concerne la fenêtre de non-fusion à bas moment angulaire et le deuxième, l'émission rapide de particules légères (nucléons, particules α). Dans les deux cas, on observe une conséquence de la quasi-indépendance des nucléons telle qu'elle est décrite par TDHF. Les nucléons du projectile qui avant la collision rebondissent à l'intérieur de la surface nucléaire pénètrent dans la cible dès que les ions entrent en contact. En première approximation on peut considérer que chaque nucléon se déplace à la vitesse qu'il possédait par rapport au fond du puits de potentiel du noyau auquel il appartenait initialement, augmentée de la vitesse relative des ions. Les uns après les autres, les nucléons vont donc frapper et en général rebondir sur la paroi nucléaire qui fait face à la fenêtre d'entrée. Il va s'en suivre un ensemble complexe de réflexions sur des surfaces nucléaires elles-mêmes mouvantes de par la self-consistance des équations. De plus, les effets de distortion ou d'accélération évoqués à la fin du chapitre précédent vont apparaître. En général tous ces phénomènes tendent à détruire la cohérence du choc et conduisent à une dissipation complète de l'énergie cinétique relative qui se trouve alors transférée au mouvement interne des nucléons. C'est ce type de phénomène que nous avons choisi d'appeler événement de fusion. Cependant, pour des énergies de bombardement assez grandes le groupe des orbitales qui initialement composait le projectile atteint le côté opposé de la cible avec une énergie suffisante pour surmonter la barrière (coulombienne plus potentielle) et s'échapper, conduisant ainsi à un type très original de collision profondément inélastique. Dans le cas d'une collision frontale on peut par des arguments cinématiques simples estimer cette énergie seuil E_s par la relation

$$E_s = V_c + \frac{A_2}{A_1} (A_1 + A_2) \epsilon_F \left(\sqrt{1 + \frac{B}{\epsilon_F}} - 1 \right)$$

où V_c est l'énergie de la barrière de Coulomb au point de contact des noyaux ϵ_F l'énergie de Fermi (~ 40 MeV) et B la position du niveau de Fermi (~ 8 MeV). On peut remarquer que c'est cet effet de transparence qui est à l'origine de l'apparition d'un plateau dans les sections efficaces de fusion, plateau qui est justement observé expérimentalement. Il faut cependant dire que tous les efforts expérimentaux s'attachant à mettre en évidence directement le phénomène de transparence se sont révélés négatifs. Cependant, les échecs peuvent être dû au fait que ces expériences ont été faites pour des énergies trop légèrement supérieures aux valeurs prédites par TDHF pour l'énergie seuil. Depuis des calculs ont montré que cette énergie dépend de façon sensible de l'interaction nucléon-nucléon. En conséquence, pour infirmer de façon convaincante le phénomène de transparence, les expériences devraient être refaites à plus haute énergie.

Au contraire, l'émission rapide de particules légères (appelée PEP) semble avoir une confirmation expérimentale. Elle a été observée pour des particules α et des nucléons. Sa présence dans les calculs TDHF se voit clairement sur la figure 6. On y observe l'émission de neutrons le long de l'axe de collision et dans la direction du faisceau incident. Une analyse plus détaillée montre que ces neutrons proviennent pour l'essentiel des orbitales $1p$ du projectile comme on s'y attend pour des particules PEP. Les résultats TDHF sont par ailleurs en bon accord avec ceux qu'on déduit d'un modèle de gaz de Fermi à température nulle comme d'ailleurs avec les données expérimentales. Par exemple la multiplicité moyenne de neutrons rapides en coïncidence

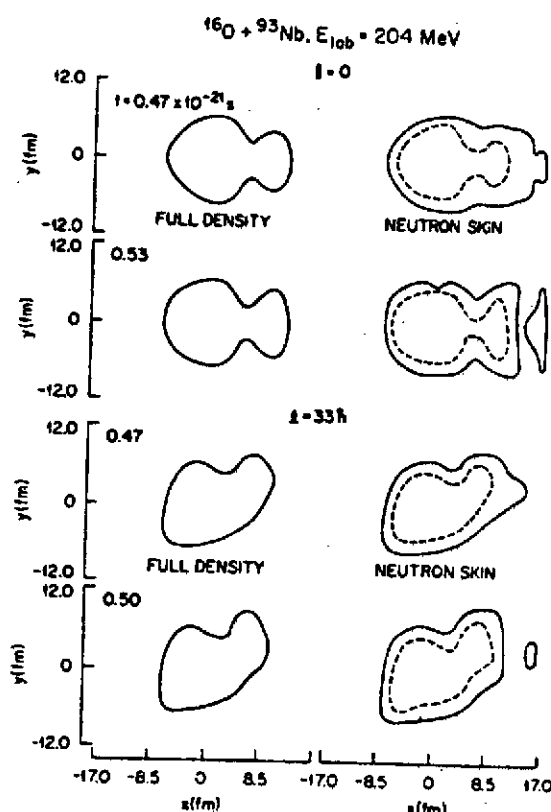


Figure 6 : Lignes niveau de la densité nucléaire dans le plan de réaction pour deux instants et deux paramètres d'impact d'une collision $^{16}\text{O} + ^{93}\text{Nb}$. La partie gauche de la figure montre la ligne de niveau correspondant à $\rho_0/10$ ($\rho_0 = 0.15 \text{ fm}^{-3}$). Sur la partie droite on a indiqué en tirets cette même courbe de niveau et en trait plein la ligne de niveau $\rho_0/100$.

avec des collisions profondément inélastiques a été calculée égale à $M_Y = 0.19$ alors que l'expérience fournit 0.15 ± 0.05 .

6) ETUDE DE RESONANCES GEANTES

Pour l'étude des modes collectifs de vibrations des noyaux on s'inspire de la parenté entre TDHF et l'approximation de la phase aléatoire dont on sait qu'elle se dérive à partir de TDHF si l'on se restreint à des mouvements d'amplitude infinitésimale. Après avoir excité le noyau par l'opérateur le plus adéquat et qui dépend bien sûr de la vibration qu'on veut étudier on enregistre les oscillations d'une observable significative du mode vibratoire (en général un moment multipolaire de la densité). Une analyse temporelle de Fourier fait alors apparaître l'énergie de la résonance comme un pic dans le spectre de Fourier⁵⁾.

Par exemple sur la figure 7, on peut voir un exemple d'identification d'énergie de vibrations monopolaires. Par un calcul Hartree-Fock contraint on a engendré un état initial pour lequel le rayon de la densité des protons était supérieur à celui des neutrons. Le calcul TDHF montre alors (partie supérieure et médiane) de fortes oscillations isovecteur (neutrons et protons en opposition de phase) combinées à une faible vibration isoscalaire (partie inférieure de la figure). L'analyse de Fourier montre clairement un pic monopolaire isoscalaire à 30 MeV et des pics isovecteurs à 39 MeV dans les transformées associées aux rayons de neutron et de protons. Par ce type d'étude on a pu retrouver les énergies des résonances géantes telles qu'elles avaient déjà été obtenues au moyen de la RPA.

Ce procédé d'analyse a récemment eu une application dans une tentative d'explication de résultats expérimentaux obtenu par le groupe de N. Frascaria à Orsay⁶⁾. Dans des collisions de

noyaux ^{40}Ca sur ^{40}Ca à $E_{\text{lab}} = 400$ MeV ce groupe a observé des structures dans la section efficace inélastique ainsi que dans celles associées au transfert de quelques nucléons. Le caractère le plus remarquable de ces structures est qu'elles apparaissent à des énergies très élevées : 25, 50, 80 MeV. Par ailleurs, elles ne sont observées que pour des collisions tangentielles. Nous avons modélisé cette expérience ⁷⁾ en nous attachant à reproduire les conditions expé-

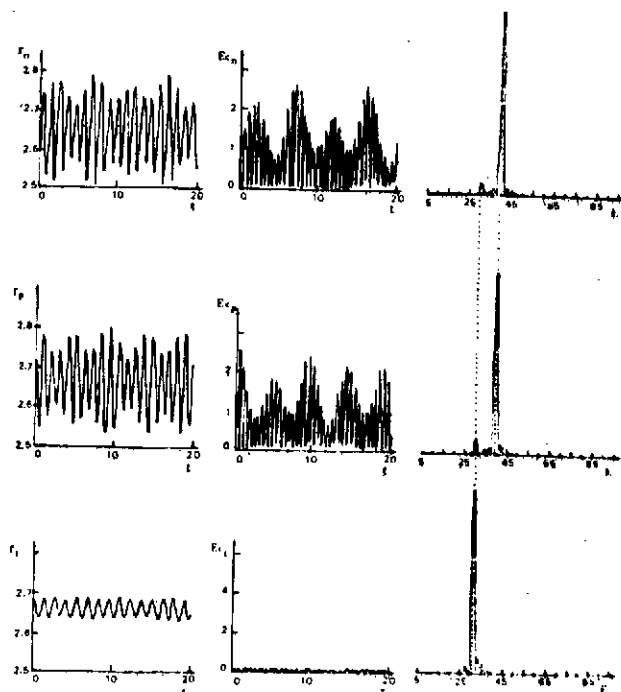


Figure 7 : Vibrations monopolaires isoscalaires et isovectorielles du noyau ^{16}O . Les rayons sont donnés en fm, les temps en 10^{-22} s et les énergies en MeV.

périmentales d'énergie et d'angle de déflexion. Puis nous avons suivi en fonction du temps l'évolution de la densité d'un des fragments émergents. Enfin, nous avons effectué une analyse de Fourier des moments de la densité du type $\langle x^m y^n z^p \rangle$, m, n, p entiers. Quelques résultats de ce

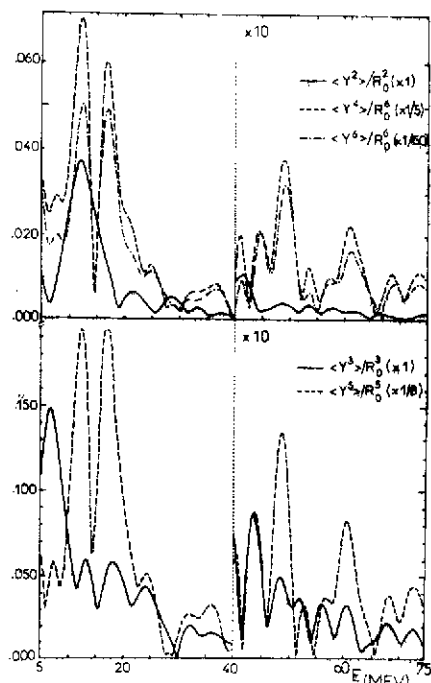


Figure 8 : Transformée de Fourier des moments $\langle y^n \rangle / R_0^n$ (voir texte). La coordonnée y est mesurée le long d'une direction principale d'inertie du fragment. La partie supérieure de la courbe montre les moments pairs $n = 2, 4, 6$ et la partie inférieure les moments impairs. Les courbes sont multipliées par 10 pour $E > 40$ MeV. De plus chacune a été renormalisée par un facteur indiqué sur la figure afin d'en faciliter la comparaison.

travail sont portés sur la figure 8. On voit qu'en plus des résonances géantes de basse énergie ($E < 30$ MeV), apparaissent dans le spectre des pics, certes de hauteur plus faible mais se détachant nettement du bruit de fond. Le travail se poursuit présentement par une analyse multipolaire de ces modes ainsi que par la recherche de leur facteur de forme. Tel quel, il illustre déjà bien ce que dans l'introduction j'avais mentionné des possibilités d'utilisation de TDHF en dehors des sentiers battus.

LECON II

L'INTEGRALE DE CHEMIN SON APPLICATION EN PHYSIQUE NUCLEAIRE

1) INTRODUCTION

Voilà plus de trente ans que la méthode des intégrales de chemins a été proposée par Feynman ⁸⁾. Bien que son importance soit universellement reconnue, elle a été relativement peu utilisée et reste finalement un objet théorique mystérieux, voire un peu effrayant. Vous ne devez pas espérer des quelques pages qui suivent qu'elles lèveront tous les voiles du mystère. Il y a à cela au moins deux raisons ; la première est que tous les problèmes liés à la méthode des intégrales de chemin ne sont pas clairs même pour les spécialistes, la seconde est que je ne suis pas un de ces spécialistes. Malgré cela j'espère vous faire sentir l'attrait conceptuel de cette approche de la mécanique quantique, et vous décrire certaines de ses possibilités d'application pratique. Les applications à la physique nucléaire seront cantonnées à quelques chapitres. En particulier, dans les deux derniers je montrerai comment l'étude d'intégrales de chemins dans l'espace des champs moyens peut servir notre discipline. Auparavant afin de mettre en évidence ce qui dans la dérivation relève des techniques de champ moyen proprement dit et ce qui appartient au formalisme des intégrales de chemins je ferai de cette dernière méthode une rapide description.

La méthode des intégrales de chemins s'attache à définir la mécanique quantique à partir de la mécanique classique. A tout l'arsenal de cette branche de la physique elle ajoute deux "ingrédients" : une notion quantique et un procédé. La notion est celle de probabilité. On admet en effet que toute la dynamique du système est décrite par la probabilité qu'on a de l'observer en un endroit et un temps donnés (q_b, t_b) sachant que sa position q_a était connue à un temps antérieur t_a . Nous la noterons

$$\langle q_b t_b | q_a t_a \rangle$$

Le procédé de calcul est la construction de Huygens. Il est bien connu que cette construction permet d'obtenir un grand nombre de résultats de l'optique ondulatoire (tous ceux pour la compréhension desquels la nature électromagnétique de l'onde lumineuse n'importe pas) à partir des résultats de l'optique géométrique. Si l'on envoie une onde sur un écran C percé de deux fentes et que l'on observe l'amplitude ϕ (qui joue ici le rôle de la probabilité $\langle q_b t_b | q_a t_a \rangle$) sur un écran E on vérifie (on observe en fait l'intensité $\sim |\phi|^2$) que celle-ci se calcule comme la somme de contributions provenant de chacune des fentes.

$$\phi \propto e^{ikL_1} + e^{ikL_2}$$

donnant lieu au phénomène bien connu d'interférence (Figure 1). Les quantités kL_1 et kL_2

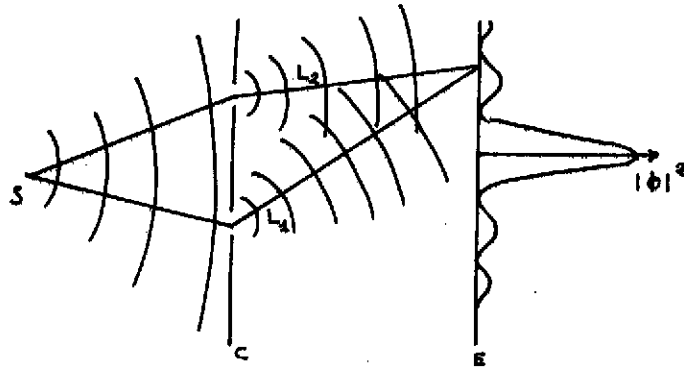


Figure 1

sont les chemins optiques parcourus par les ondes lumineuses depuis chaque fente jusqu'au point de l'écran considéré. La construction de Huygens généralise ce procédé de construction en faisant abstraction des fentes et affirme que l'amplitude observée sur un écran E éclairé par une source

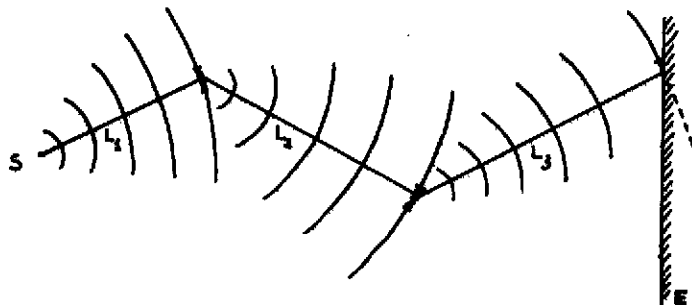


Figure 2

S peut-être obtenu en considérant chaque point de l'espace comme réémettant de la lumière, et en sommant les amplitudes (Figure 2)

$$\phi = \sum_{\text{chemins}} e^{ik(L_1 + L_2 + L_3)}$$

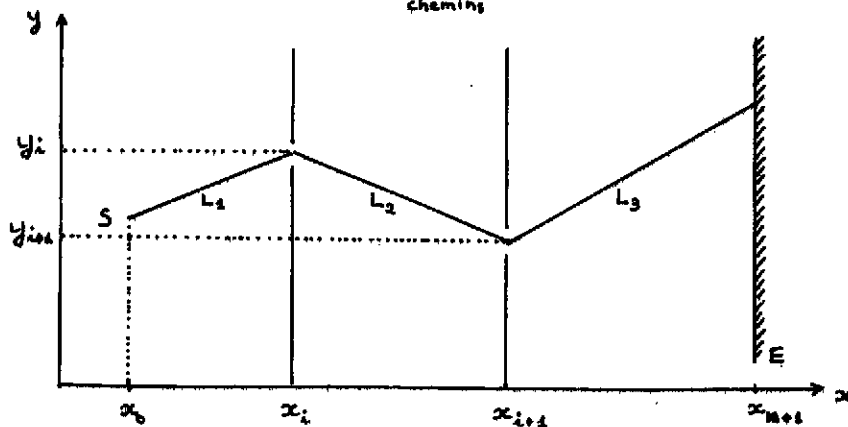


Figure 3

Pour mieux comprendre la signification de cette somme on peut réintroduire des écrans (Figure 3) aux abscisses x_1, x_2, \dots, x_n . Le nombre et la forme de ces écrans importent peu pourvu que l'indice des milieux change peu entre deux écrans consécutifs. Si on dénote y_i la coordonnée courante sur l'écran d'abscisse x_i , on aura

$$\sum_{\text{chemins}} \equiv \int dy_1 \int dy_2 \dots \int dy_n$$

et

et

$$k_i L_i = k_i \sqrt{(x_{i+1} - x_i)^2 + (y_{i+1} - y_i)^2} \quad *$$

Si l'on décide d'utiliser ce procédé de construction, la mécanique classique remplaçant l'optique géométrique comme matériau de base, il faut bien sûr employer l'équivalent mécanique du chemin optique. Cet équivalent est bien connu ; c'est l'action S .

$$S = \int_{t_a}^{t_b} L dt \quad (1)$$

qui s'obtient en intégrant sur le temps la fonction de Lagrange L

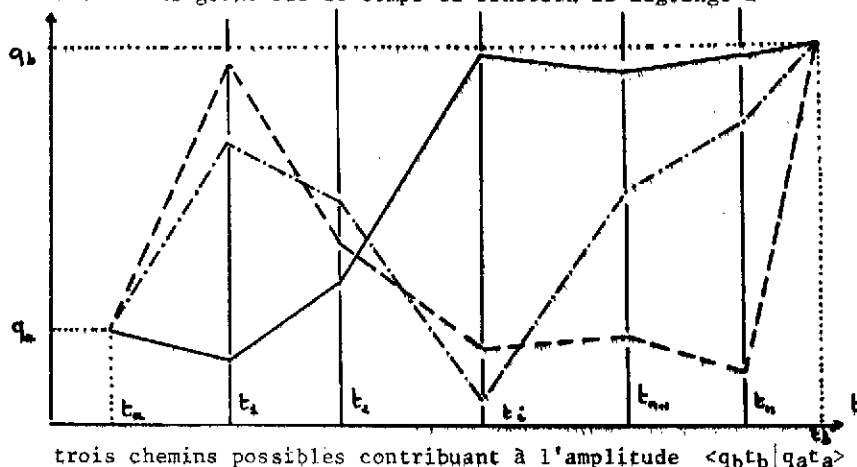


Figure 4

On sait en effet que cette quantité est extrémale pour la trajectoire classique ce qui est aussi la propriété fondamentale du chemin optique. On va donc chercher à écrire l'amplitude $\langle q_b t_b | q_a t_a \rangle$ sous la forme

$$\langle q_b t_b | q_a t_a \rangle = \sum_{\text{chemins}} e^{\frac{i}{\hbar} S(\text{chemin})}$$

où nous avons introduit le facteur de proportionnalité \hbar . A la limite $\hbar \rightarrow 0$, on retrouve bien la mécanique classique car la seule contribution non nulle sera celle qui viendra du (ou des) chemin(s) rendant stationnaire la phase, c'est-à-dire l'action.

Dans ce qui suit, après un rappel de certains résultats de mécanique classique, j'explicitierai ce qu'on entend par le symbole \sum_{chemins} et ce en me restreignant d'abord au cas unidimensionnel.

2) QUELQUES RESULTATS DE MECANIQUE CLASSIQUE

En mécanique classique ⁹⁾, la dynamique d'un système est contenue dans la fonction de Lagrange qu'on lui associe

$$L \equiv L(q, \dot{q}) \quad (2)$$

Les trajectoires que suit le système sont alors déterminées par le principe de Hamilton qui

*En toute rigueur, il faudrait tenir compte de l'amortissement de l'amplitude avec L qui apparaîtrait alors comme une contribution imaginaire au chemin optique.

postule que la trajectoire classique

$$q_d(t)$$

est celle pour laquelle l'action est extrémale

$$\delta S = 0 \quad (3)$$

La variation S doit se comprendre comme le changement de la valeur de l'intégrale (1) pour une variation infinitésimale de la fonction

$$q(t) \rightarrow q(t) + \delta q(t)$$

satisfaisant aux conditions

$$q_a(t_a) \equiv q_a \quad q(t_b) \equiv q_b \quad (4)$$

c'est-à-dire

$$\delta q(t_a) = \delta q(t_b) = 0 \quad (5)$$

Du principe de Hamiltonien découlent les équations de Lagrange

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial L}{\partial q} = 0 \quad (6)$$

On peut alors dériver un ensemble de propriétés telles que

$$\dot{q}(t) = \frac{\partial H}{\partial p} \quad ; \quad \dot{p}(t) = - \frac{\partial H}{\partial q} \quad (7)$$

où nous avons introduit l'impulsion et la fonction du Hamiltonien

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \quad ; \quad H = p \dot{q} - L \quad (8)$$

L'action peut aussi s'écrire au moyen de la fonction de Hamiltonien sous la forme

$$S = \int_{t_a}^{t_b} (p(t) \dot{q}(t) - H(p(t), q(t))) dt \quad (9)$$

et la trajectoire classique est alors obtenue comme celle qui extrémise S pour des variations indépendantes des fonctions $p(t)$ et $q(t)$ satisfaisant aux conditions (5). Passant maintenant à des résultats relatifs à l'action stationnaire, on rappelle d'abord trois équations bien connues

$$\left. \frac{\partial S_{st}}{\partial q_b} \right|_{q_a, t_a, t_b} = p(t_b); \quad \left. \frac{\partial S_{st}}{\partial q_a} \right|_{q_b, t_a, t_b} = -p(t_a); \quad \left. \frac{\partial S_{st}}{\partial t_b} \right|_{q_a, q_b, t_a} = -H(p(t_b), q(t_b)) \quad (10)$$

Un autre résultat moins connu concernant la dérivée seconde de l'action stationnaire nous sera utile plus loin

$$\frac{\partial^2 S_{st}}{\partial q_a \partial q_b} = \frac{m^2}{p(t_a)p(t_b)} \frac{\partial E}{\partial t_b} = -m \left(p(t_a)p(t_b) \int_{t_a}^{t_b} \frac{dt}{p^3(t)} \right)^{-1} \quad (11)$$

En effet on a

$$\frac{\partial^2 S_{st}}{\partial q_a \partial q_b} = \frac{\partial}{\partial q_a} (p(t_b)) = \frac{m}{p(t_b)} \frac{\partial E}{\partial q_a} = - \frac{m}{p(t_b)} \frac{\partial^2 S}{\partial q_a \partial t_b} = \frac{m}{p(t_b)} \frac{\partial p(t_b)}{\partial t_b} = \frac{m^2}{p(t_a)p(t_b)} \frac{\partial E}{\partial t_b}$$

Dans cette chaîne d'égalités la seconde et la dernière découlent de la relation valable en tout point q de la trajectoire

$$p = \left(2m(E(q_a, q_b, t_a, t_b) - V(q)) \right)^{1/2}$$

maintenant on remarque que

$$t_b - t_a = \int_{t_a}^{t_b} dt = \int_{q_a}^{q_b} \frac{mdq}{p}$$

d'où l'on déduit

$$\left. \frac{\partial t_b}{\partial E} \right|_{q_a, q_b, t_a} = - \int_{q_a}^{q_b} \frac{m dq}{p^2} \frac{\partial p}{\partial E} = - \int_{q_a}^{q_b} \frac{m^2 dq}{p^3} = - \int_{t_a}^{t_b} \frac{m dt}{p^2}$$

et la dernière égalité de 11.

3) DEFINITION DE L'INTEGRALE DE CHEMINS

On définit l'intégrale fonctionnelle au moyen d'un passage à la limite qui met sous forme mathématique l'image heuristique des chemins telle qu'elle a été présentée dans l'introduction. Avant le passage à la limite on ne manipule que de la mathématique traditionnelle (celle qu'on apprend en maîtrise voire avant). Après le passage à la limite on ne sait plus très bien ce que l'on a dans les mains. De là vient le sentiment d'insécurité qu'engendre parfois la méthode des intégrales de chemins. "Quelles sont les manipulations licites des expressions formelles que l'on obtient ?", est une question qui est loin d'être résolue. Cependant, cette situation n'est pas si grave qu'on pourrait le penser. Il faut en effet se rappeler que tout est parfaitement défini avant le passage à la limite. Dans le doute on peut calculer avant ce passage, étudier la limite du résultat, et vérifier alors la justesse des calculs formels. Dans ce qui suit je vais donc manipuler des expressions continues souvent mal définies mais qui ont l'avantage, d'être d'écriture simple, et de faire apparaître plus clairement la physique du problème que les formules discrétisées dont elles sont la limite. Enfin on peut mentionner qu'aucune ambiguïté n'existe pour les calculs sur ordinateur puisque ceux-ci ne peuvent se faire que sur des expressions discrétisées.

La formation de l'idée de chemins commence par un découpage de l'intervalle de temps $t_b - t_a$ en N intervalles égaux.

On définit alors un chemin par un choix de quantités

$$q_n \equiv q(t_n) \quad ; \quad p_n \equiv p(t_n)$$

et on remplace

$$\int_{t_a}^{t_b} dt (p \dot{q} - H(p, q, t)) \equiv S$$

par

$$S_N(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_{N+1}) = \sum_{n=1}^{N+1} \epsilon \left\{ p_n \frac{q_n - q_{n-1}}{\epsilon} - H(p_n, q_n, t_n) \right\} \quad (12)$$

On posera alors

$$\langle q_b t_b | q_a t_a \rangle = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ N\epsilon = t_b - t_a}} \int \dots \prod_{n=1}^N \frac{dq_n dp_n}{2\pi\hbar} \frac{dp_{N+1}}{2\pi} e^{\frac{i}{\hbar} S_N(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_{N+1})} = \int \frac{dq_1 dp_1}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} S(q_1, p_1)} \quad (13)$$

la notation formelle introduite par la dernière égalité doit donc toujours être comprise comme la limite du résultat des intégrales*. Dans le cas particulier (mais particulièrement intéressant) où l'hamiltonien se compose d'une énergie cinétique et d'une énergie potentielle

$$H(q, p, t) = \frac{p^2}{2m} + V(q, t) \quad (14)$$

on peut pousser plus avant en effectuant les intégrales sur les variables p_n (il s'agit d'intégrales gaussiennes). On aboutit alors à la formulation proposée initialement par Feynmann

$$\langle q_b t_b | q_a t_a \rangle = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ N\epsilon = t_b - t_a}} \int \dots \prod_{n=1}^N \frac{dq_n}{A} e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^N \left\{ \frac{m}{2} \left(\frac{q_n - q_{n-1}}{\epsilon} \right)^2 - V(q_n, t_n) \right\} \epsilon} \quad (15)$$

avec

$$A = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (16)$$

On reconnaît dans la phase de l'exponentielle de la formule (15) une version discrétisée du Lagrangien associée à l'hamiltonien (14)

*Je n'évoquerai pas le problème engendré par l'existence de nombreuses approximations discrètes autre que (12) qui à limite $\epsilon \rightarrow 0$ tendent vers l'action S . (Par exemple remplacer $H(p_n, q_n, t_n)$ par $(H(p_n, q_n, t_n) + H(p_n, q_{n-1}, t_n))/2$). Ce problème est lié à celui de la définition en mécanique quantique de l'opérateur associé à une quantité classique contenant des produits de grandeurs dont les opérateurs quantiques associés ne commutent pas ; par exemple $H \cdot p q$. Il n'apparaît pas pour l'hamiltonien (14).

$$L = \frac{1}{2} m \dot{q}^2 - V(q, t) \quad (17)$$

On peut donc dans ce cas particulier de Lagrangien écrire formellement l'intégrale de chemin sous la forme

$$\langle q_b t_b | q_a t_a \rangle = \int \mathcal{D}q e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} L(q, \dot{q}, t) dt} = \int \mathcal{D}q e^{\frac{i}{\hbar} S(q)} \quad (18)$$

où le symbole $\int \mathcal{D}q$ remplace $\lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ N\epsilon = \text{cst.}}} \int \dots \int \frac{1}{A} \prod_{i=1}^N \frac{dq_i}{A}$

4) RELATION AVEC LA MECANIQUE QUANTIQUE

Si on se donne un espace de Hilbert engendré par les vecteurs $|q\rangle$ vérifiant

$$(q|q') = \delta(q-q') \quad ; \quad \mathbb{1} = \int dq |q\rangle \langle q| \quad (19)$$

dans lequel on définit les opérateurs \hat{q} et \hat{p} de façon traditionnelle par

$$(q|\hat{q}|q') = q (q|q') \quad ; \quad (q|\hat{p}|q') = -\frac{i}{\hbar} \partial_q (q|q') \quad (20)$$

on peut associer à l'ensemble des nombres $\langle q t_b | q' t_a \rangle$ pour t_a et t_b fixés un opérateur $\hat{U}(t_b, t_a)$ de cet espace de Hilbert par la définition

$$(q|\hat{U}(t_b, t_a)|q') = \langle q t_b | q' t_a \rangle \quad (21)$$

On peut facilement en vérifier quelques propriétés. En effet la définition (13) entraîne

$$\int dq'' \langle q t_b | q'' t_c \rangle \langle q'' t_c | q' t_a \rangle = \langle q t_b | q' t_a \rangle \quad (22)$$

(le fait qu'il y ait $N+1$ intégrales sur p et seulement N sur q dans (13) est ce qu'il faut remarquer pour faire la démonstration), on en déduit en utilisant (19) et (21)

$$\hat{U}(t_b, t_a) = \hat{U}(t_b, t_c) \hat{U}(t_c, t_a) \quad (23)$$

quelque soient t_a , t_b et t_c . De même la propriété évidente de (13)

$$\langle q t_b | q' t_a \rangle = \langle q' t_a | q t_b \rangle^* \quad (24)$$

se transcrit en

$$\hat{U}(t_b, t_a) = \hat{U}^\dagger(t_a, t_b) \quad (25)$$

Pour montrer l'équivalence avec la théorie de Schrödinger il nous vérifie que l'opérateur $\hat{U}(t_b, t_a)$ défini par 21 est bien identique à l'opérateur d'évolution*

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_b - t_a)\right) \quad (26)$$

où l'opérateur hamiltonien est défini par

$$\hat{H} \equiv \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q}) \quad (27)$$

On remarque d'abord que les éléments de matrice de \hat{H} s'écrivent

$$\langle q | \hat{H} | q' \rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \left(\frac{p^2}{2m} + V(q) \right) e^{\frac{i}{\hbar} p(q-q')} = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} H(q, p) e^{\frac{i}{\hbar} p(q-q')} \quad (28)$$

Par ailleurs, si ϵ est un infiniment petit, on a

$$\begin{aligned} \langle q | e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} \hat{H}} | q' \rangle &= \langle q | 1 - i\frac{\epsilon}{\hbar} \hat{H} | q' \rangle + O(\epsilon^2) \\ &= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \left(1 - i\frac{\epsilon}{\hbar} H(q, p) \right) e^{\frac{i}{\hbar} p(q-q')} + O(\epsilon^2) \\ &= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp \frac{i}{\hbar} (p(q-q') - \epsilon H(q, p)) + O(\epsilon^2) \end{aligned} \quad (29)$$

d'après les définitions (13), (21) on aura

$$\begin{aligned} \langle q_b | \hat{U}(t_b, t_a) | q_a \rangle &= \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ N\epsilon = t_b - t_a}} \int \prod_{n=1}^N dq_n \left\{ \prod_{m=1}^{N+1} \int \frac{dp_m}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} (p_m(q_n - q_{n-1}) - \epsilon H(q_n, p_m))} \right\} \\ &= \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ N\epsilon = t_b - t_a}} \int \prod_{n=1}^N dq_n \left\{ \prod_{m=1}^{N+1} \left(\langle q_n | e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} \hat{H}} | q_{n-1} \rangle + O(\epsilon^2) \right) \right\} \\ &= \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ N\epsilon = t_b - t_a}} \int \prod_{n=1}^N dq_n \left\{ \langle q_b | e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} \hat{H}} | q_N \rangle \langle q_N | e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} \hat{H}} | q_{N-1} \rangle \dots \langle q_2 | e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} \hat{H}} | q_1 \rangle \langle q_1 | e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} \hat{H}} | q_a \rangle + (N+1) O(\epsilon^2) \right\} \end{aligned} \quad (30)$$

Au passage à la limite le terme $(N+1) O(\epsilon^2)$ tend vers zéro, on peut alors le négliger et effectuer les intégrales sur q_n en utilisant (19), on trouve alors

* Pour simplifier, nous nous limiterons à des hamiltoniens indépendants du temps. Dans le cas contraire il faut faire attention à l'ordre des termes des produits apparaissant dans la formule (30).

$$(q_b | \hat{U}(t_b, t_a) | q_a) = (q_b | \exp - \frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_b - t_a) | q_a)$$

qui est justement la propriété cherchée

5) APPLICATIONS DE LA METHODE DES INTEGRALES DE CHEMINS

Maintenant que nous avons vu que la théorie de Schrödinger et la méthode des intégrales de chemins décrivent la même physique on peut se demander quelles applications on peut faire de cette dernière formulation. On peut en distinguer trois types : celles où l'on calcule analytiquement l'intégrale de chemins, celles où l'on cherche à l'évaluer numériquement et enfin celles où on l'utilise comme point de départ pour des approximations.

a) Calcul analytique de l'intégrale de chemins

Le calcul exact des intégrales de chemins n'a pu être effectué que dans un nombre de cas très réduits bien inférieur à celui des problèmes résolus analytiquement au moyen de l'équation de Schrödinger. En dehors du problème de la particule libre et de l'oscillateur harmonique résolus par Feynmann dans son premier travail, on peut citer le puits carré infini à une dimension et le potentiel coulombien à trois dimensions. Le calcul pour des potentiels aussi simples que le puits infini à symétrie sphérique ou le puits carré unidimensionnel de profondeur finie n'a pas encore été réalisé. La quantité d'astuce qu'il a fallu mettre en oeuvre pour résoudre un problème aussi simple que le puits infini à une dimension, a d'ailleurs de quoi rendre circonspect quiconque aurait l'envie de s'attaquer à des cas plus compliqués.

b) Evolution numérique des intégrales de chemins

Si peu de chose peut être fait analytiquement qu'en est-il numériquement ? Là aussi rien n'est obtenu sans risque et sans peine.

Scher, Smith et Baranger¹⁰⁾ ont essayé de trouver les fonctions d'onde et les énergies dans un potentiel à une dimension en évaluant la transformée de Fourier de $\langle x t | x' 0 \rangle$ calculée au moyen d'une intégrale de chemins. Ils se basent en effet sur l'écriture suivante de la probabilité de transition.

$$\langle x t | x' 0 \rangle = \langle x | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} | x' \rangle = \sum_n \langle x | n \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \langle n | x' \rangle = \sum_n \psi_n(x) \psi_n^*(x') e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \quad (31)$$

d'où l'on peut déduire

$$\lim_{\eta \rightarrow +0} \int_0^\infty dt e^{\frac{i}{\hbar} (E + i\eta) t} \langle x t | x' 0 \rangle = \sum_n \frac{i \hbar \psi_n(x) \psi_n^*(x')}{E - E_n} \quad (32)$$

En étudiant la position des pôles et les résidus de la transformée de Fourier, on peut donc en principe avoir une connaissance complète de spectre et des états propres. Se tenant à la définition de l'intégrale de chemins Scher et ses collaborateurs ont construit l'intégrale pour une valeur assez grande de N en choisissant au hasard des chemins q_n et en ajoutant les contributions e^{iS} . Même après élimination des chemins oscillant trop violemment il n'a pas été possible d'obtenir des résultats sensés. La raison de cet échec tient à ce que dans l'intégrale exacte

beaucoup des contributions de chemins tendent à s'annuler alors que cette annulation est inexacte pour des chemins choisis au hasard. Le fait que chacun des chemins apporte une contribution de module 1 n'est certainement pas étranger aux problèmes numériques rencontrés lors de ce travail.

Une façon plus efficace de procéder consiste à introduire un temps imaginaire et à calculer l'intégrale (15) qui prend alors la forme

$$\langle q-i\tau | q'0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta\tau}} \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{n=1}^N \frac{dq_n}{\sqrt{2\pi\Delta\tau}} e^{-\frac{i}{\hbar} \sum_1 \left\{ \frac{m}{2} \left(\frac{q_i - q_{i-1}}{\Delta\tau} \right)^2 + V(q_i) \right\} \Delta\tau} \quad (33)$$

L'intégrale est alors définie positive (en fait dans ce cas l'intégrale de chemin est mathématiquement parfaitement définie) et beaucoup de trajectoires n'apportent que des contributions négligeables au résultat. On peut alors utiliser des techniques de Monte-Carlo en pondérant le choix des trajectoires au moyen du facteur de poids exponentiel contenu dans (33). Creutz et Freedman ont traité quelques problèmes simples à une dimension par cette méthode⁽¹¹⁾. Ils évaluent pour de grandes valeurs de τ la quantité

$$\int dx \langle x-i\tau | x0 \rangle = \sum_n e^{-E_n \tau}$$

qui est alors dominée par l'état fondamental. Ils font ensuite un histogramme des points x_j de l'ensemble pour obtenir la fonction d'onde du fondamental. Le résultat correspondant est montré sur la figure 5. De même par le calcul de la quantité $(x(0), x(\tau))$ définie comme

$$(x(0), x(\tau)) = \lim_{\tau_i \rightarrow \infty} \int dx \langle x-i\tau_i | x-i\tau \rangle \langle x-i\tau | x0 \rangle = \sum_m e^{-\frac{i}{\hbar} (E_m - E_0) \tau} \int dx |\psi_m(x)|^2 |\psi_0(x)|^2 \quad (34)$$

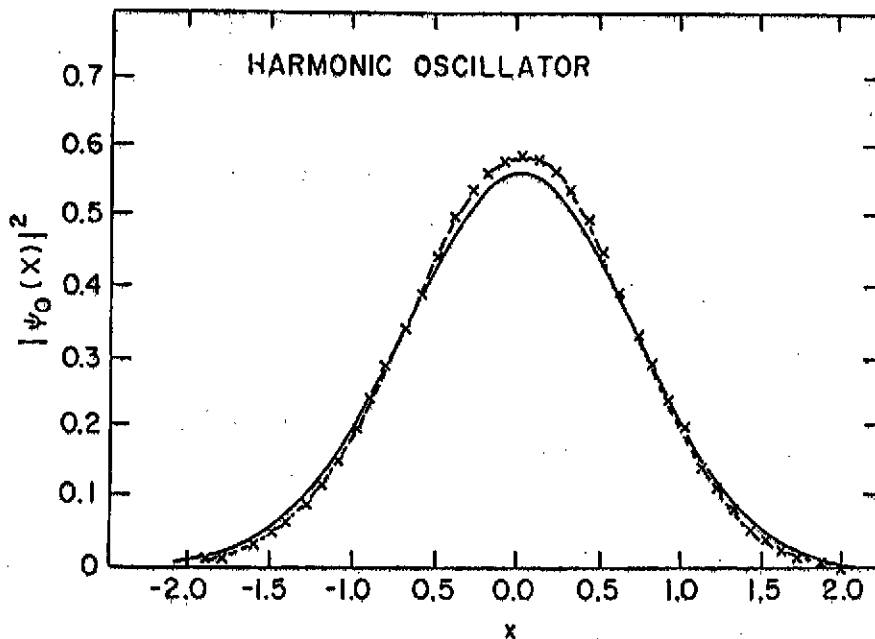


Figure 5 : Probabilité de présence pour l'état fondamental d'un oscillateur harmonique. Les croix indiquent les résultats du calcul de Monte-Carlo. Le résultat exact est donné par la courbe en trait plein.

qui pour τ grand est dominée par le facteur exponentiel $\exp -\frac{\tau}{\hbar} (E_1 - E_0)$ on peut obtenir une évaluation de la position du premier état excité. Sur la figure 6, on peut voir le résultat pour un potentiel d'oscillateur anharmonique $V(x) = \lambda (x^2 - f)^2$. Cette discussion montre donc

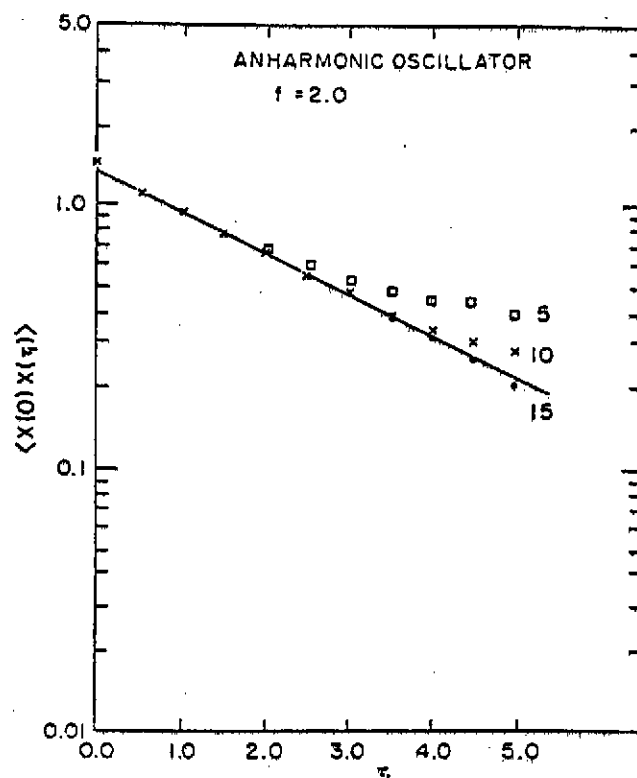


Figure 6 : Fonction de corrélation (voir texte) d'un oscillateur anharmonique portée en fonction du temps τ . La ligne en trait plein est le résultat attendu d'après un calcul exact de l'énergie du premier état excité. Les nombres et les symboles indiquent la valeur d'un paramètre de l'algorithme de Monte-Carlo.

que, manipulée correctement, l'intégrale de chemins peut fournir la solution complète d'un problème quantique. Cependant, en regard aux difficultés numériques à surmonter, ce n'est certainement pas une méthode d'avenir pour les problèmes à une ou peu de dimensions pour lesquels la résolution directe de l'équation de Schrödinger reste la méthode la plus simple.

c) L'approximation stationnaire

La forme même de l'intégrale de chemins (13) (18) suggère d'en explorer la limite classique par la méthode de la phase stationnaire. En effet, à l'exception du voisinage de la trajectoire classique qui extremise S on peut s'attendre à une annulation des contributions des chemins infiniment voisins. Partant de la formulation de Feynman (18), nous effectuons un développement de Taylor autour de la trajectoire classique en posant

$$q(t) = q_{st}(t) + \delta q(t) \quad ; \quad \delta q(t_a) = \delta q(t_b) = 0 \quad (35)$$

On obtient alors l'approximation suivante

$$\langle q(t_b) | q'(t_a) \rangle \simeq e^{\frac{i}{\hbar} S_{st}(q, q', t_b, t_a)} \int \mathcal{D}q \, e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \, \delta q(t) \frac{\delta^2 S}{\delta q(t) \delta q(t)}} \delta q(t) \quad (36)$$

où nous avons introduit la "matrice" dérivée seconde de l'action calculée autour de la trajectoire classique, qui pour un hamiltonien de type (14) s'écrit

$$\frac{\partial^2 S}{\partial q(t) \partial q(t')} = -m \delta(t-t') - \frac{\partial^2 V}{\partial q^2}(q_{st}(t)) \delta(t-t') \quad (37)$$

Démonstration:

$$S = \int_{t_a}^{t_b} dt \left(\frac{m}{2} \left(\frac{dq}{dt} \right)^2 - V(q) \right)$$

pour une variation $\delta q_1(t)$ satisfaisant la condition (35)

$$\delta S = \int_{t_a}^{t_b} dt \left(m \frac{dq}{dt} \frac{d\delta q}{dt} - \frac{\partial V}{\partial q} \delta q(t) \right) = - \int_{t_a}^{t_b} dt \left(m \frac{d^2 \delta q}{dt^2} + \frac{\partial V}{\partial q} \right) \delta q(t)$$

si on effectue de plus une variation indépendante $\delta q_2(t)$, on aura

$$\delta S = - \int_{t_a}^{t_b} dt \delta q_1(t) \left(m \frac{d^2}{dt^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial q^2} \right) \delta q_2(t) \quad \text{qui peut alors s'écrire}$$

$$\delta S = \iint_{t_a}^{t_b} dt dt' \delta q_1(t) \frac{\partial^2 S}{\partial q(t) \partial q(t')} \delta q_2(t')$$

avec la définition (37) de la matrice dérivée seconde.

Si nous considérons maintenant la matrice à indice continue comme une matrice ordinaire, on pourra effectuer l'intégrale gaussienne. (Pour mieux voir de quoi il s'agit on peut revenir à une formulation discrétisée de l'intégrale de chemin

$$\frac{1}{A} \int \prod_{n=1}^N \frac{dq_n}{A} \exp \frac{i}{\hbar \epsilon} \sum_{n,m=1}^N \delta q_n \epsilon^2 \frac{\partial^2 S_{st}}{\partial q^2}(\eta, m) \delta q_m \quad (38)$$

en considérant pour matrice $\epsilon^2 \frac{\partial^2 S_{st}}{\partial q^2}(\eta, m)$ une matrice tridiagonale du type

$$\begin{vmatrix} A_1 & B & & & \\ B & A_2 & B & & \\ & B & A_3 & B & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & B & A_{N-1} & B \\ & & & & B & A_N \end{vmatrix}$$

$$A_n = 2m - \epsilon^2 \frac{\partial^2 V}{\partial q^2}(q_{st}(t_n + n\epsilon))$$

$$B = -m$$

Pour cela on a utilisé l'approximation d'ordre 3 de l'opérateur dérivée seconde contenu dans 37, approximation qui serait d'ailleurs apparue par la variation directe de l'expression discrétisée de S dans la formule (15)), et trouver le résultat semi-classique

$$\langle q, t_b | q', t_a \rangle \approx \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i \det\left(\frac{\partial^2 S_{st}}{\partial q^2}\right)}} \exp \frac{i}{\hbar} S_{st}(q, q', t_b, t_a) \quad (39)$$

On n'aurait guère progressé s'il n'existait un moyen simple d'évaluer le déterminant de la matrice infinie. On peut en effet montrer que celui-ci est relié à la dérivée seconde de l'action stationnaire par rapport aux valeurs initiales et finales des coordonnées de la trajectoire

$$1/\det\left(\frac{\partial^2 S_{st}}{\partial q^2}\right) = -\frac{m}{P(t_a)P(t_b)} \frac{\partial E(q, q', t_b, t_a)}{\partial t_b} = -\frac{1}{m} \frac{\partial^2 S_{st}(q, q', t_b, t_a)}{\partial q \partial q'} \quad (40)$$

(La démonstration de cette propriété sera donnée ultérieurement). Compte tenu des propriétés (10) de l'action classique, nous aurons donc aussi

$$1/\det\left(\frac{\partial^2 S}{\partial q^2}\right) = -\frac{1}{m} \frac{\partial P_{st}(t_b)}{\partial q'}$$

qui nous donne l'expression particulièrement simple du résultat semi-classique

$$\langle q, t_b | q', t_a \rangle = \sqrt{\frac{i}{2\pi\hbar} \frac{\partial P_{st}(t_b)}{\partial q'}} e^{\frac{i}{\hbar} S_{st}(q, q', t_b, t_a)} \quad (41)$$

on voit donc que la probabilité d'observer le système au temps t_b sera proportionnelle à la racine carrée de la dérivée $\partial P_{st}(t_b)/\partial q'$. Celle-ci mesure la dispersion en impulsion finale des trajectoires classiques qui partant d'un point $q' + \Delta q'$ au temps t_a finissent au point q au temps t_b . Plus cette dispersion des impulsions finales (c'est-à-dire des trajectoires dans l'espace des phases au temps t_b (voir figure 7)) est importante plus la probabilité quantique sera grande

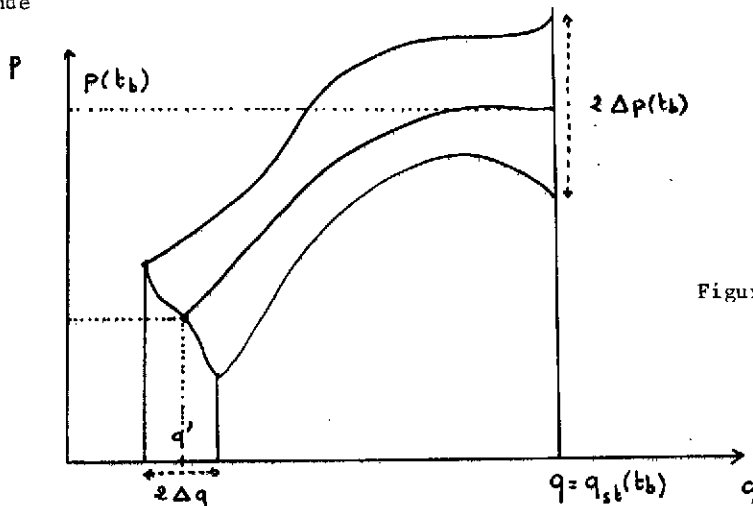


Figure 7

Il existe plusieurs démonstrations de cette formule. L'une d'entre elle particulièrement intéressante se trouve dans les articles de revue de Miller⁽²⁾ qui sont d'ailleurs une référence précieuse par bien d'autres aspects. Ici, je choisirai une démonstration qui prend pour point de départ la formulation discrétisée (38) de l'intégrale gaussienne. Après factorisation de la masse, nous devons évaluer le déterminant d'une matrice d'ordre N .

En effet (38) s'écrit :

$$\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i \varepsilon}} \int \prod_n \frac{dq_n}{\sqrt{2\pi\hbar i \varepsilon}} \exp \frac{i}{2\hbar} \sum_{n,m} \left(\varepsilon^2 \frac{\partial^2 S}{\partial q^2}(n,m) \right) q_n q_m$$

Par la transformation unitaire qui diagonalise la matrice hermitienne, $\frac{\varepsilon^2}{m} \frac{\partial^2 S}{\partial q^2}(n,m)$, on se ramène à

$$\begin{aligned} & \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i \varepsilon}} \prod_n \int \frac{dy}{\sqrt{2\pi\hbar i \varepsilon}} \exp \left(-\frac{m}{2\hbar i \varepsilon} \lambda_n y^2 \right) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i \varepsilon}} \prod_n \int \frac{dy}{\sqrt{\pi}} \exp(-\lambda_n y^2) \\ & = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i \varepsilon}} \prod_n \int \frac{dy}{\sqrt{\pi \lambda_n}} \exp(-y^2) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i \varepsilon}} \prod_n \frac{1}{\sqrt{\lambda_n}} = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i \varepsilon}} \sqrt{\lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ N \text{ entier}}} \varepsilon \det M_N} \end{aligned}$$

où M_N est la matrice $\frac{\varepsilon^2}{m} \frac{\partial^2 S}{\partial q^2}$ qui s'écrit

$$M_N = \begin{pmatrix} 2 - \varepsilon^2 f(t_1) & -1 & & & \\ -1 & 2 - \varepsilon^2 f(t_2) & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 - \varepsilon^2 f(t_{N-1}) & -1 \\ & & & -1 & 2 - \varepsilon^2 f(t_N) \end{pmatrix} \quad (42)$$

avec

$$f(t) = \frac{1}{m} \frac{\partial^2 V}{\partial q^2}(q_{st}(t)) \quad (43)$$

Nous allons calculer par récurrence ce déterminant. Si on dénote $D(t_k)$ le produit par ε du déterminant de la sous-matrice carrée obtenue en ne conservant que le bloc inférieur droit de la matrice M_N ayant $2 - \varepsilon^2 f(t_k)$ pour premier élément diagonal, on aura

$$D(t_N) = \varepsilon (2 - \varepsilon^2 f(t_N))$$

$$D(t_{N-1}) = (2 - \varepsilon^2 f(t_{N-1})) D(t_N) - \varepsilon$$

$$D(t_k) = (2 - \varepsilon^2 f(t_k)) D(t_{k+1}) - D(t_{k+2})$$

$$D(t_1) = \varepsilon \det M_N$$

on peut donc écrire l'équation aux différences

$$\frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{D(t_{k+2}) - D(t_{k+1})}{\varepsilon} - \frac{D(t_{k+1}) - D(t_k)}{\varepsilon} \right) = -f(t_{k+1}) D(t_{k+1}) \quad (44)$$

$$\frac{D(t_N) - D(t_{N-1})}{\epsilon} = -\frac{1}{\epsilon} (1 - \epsilon^2 f(t_{N-1})) D(t_N) + 1 \quad (45)$$

$$D(t_N) = 2\epsilon - \epsilon^2 f(t_N) \quad (46)$$

à la limite $\epsilon \rightarrow 0$, $\epsilon N = \text{constant}$ on a $D(t_N) \rightarrow D(t_b) = O(\epsilon)$;
la quantité $-\frac{1}{\epsilon} (1 - \epsilon^2 f(t_{N-1})) D(t_N) + 1 \rightarrow -(1 - \epsilon^2 f(t_{N-1}))(2 - \epsilon^2 f(t_N)) + 1$ tend vers $-1 + O(\epsilon)$ alors que le membre de gauche de (45) tend vers $\frac{d}{dt} D(t_b)$.
Finalement la relation de récurrence (44) tend vers l'équation différentielle

$$\frac{d^2 D}{dt^2} = -f(t) D$$

On a donc ramené le calcul du déterminant de la matrice continue ou le calcul de $\lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ N\epsilon = \text{const.}}} \epsilon \det M_N$ à la résolution dans l'intervalle $[t_a, t_b]$ de l'équation différentielle

$$\frac{d^2 D}{dt^2} = -\frac{1}{m} \frac{\partial^2 V}{\partial q^2}(q_{st}(t)) D \quad (47)$$

pour les conditions initiales

$$D(t_b) = 0 \quad ; \quad \dot{D}(t_b) = -1 \quad (48)$$

La valeur recherchée est alors la valeur pour t_a de la solution de l'équation : $D(t_a)$.

Il nous faut maintenant résoudre l'équation différentielle (47) avec les conditions aux limites (48). On vérifie immédiatement que la fonction

$$D_1(t) = \dot{q}_{st}(t) \quad (49)$$

satisfait à l'équation (47). En effet

$$\frac{d^2 D_1}{dt^2} = \frac{d}{dt} (\ddot{q}_{st}(t)) = \frac{d}{dt} \left(-\frac{1}{m} \frac{\partial V}{\partial q}(q_{st}(t)) \right) = -\frac{1}{m} \frac{\partial^2 V}{\partial q^2}(q_{st}(t)) \dot{q}_{st}(t)$$

En utilisant la méthode de "variation des constantes", on trouve une solution indépendante sous la forme

$$D_2(t) = \dot{q}_{st} \int_0^t \frac{dt'}{\dot{q}_{st}^2(t')}$$

la solution générale est donc de la forme

$$D(t) = \dot{q}_{st} \left(\alpha + \beta \int_0^t \frac{dt'}{\dot{q}_{st}^2(t')} \right)$$

et il nous faut choisir α et β de façon à satisfaire (48). Le calcul de $\dot{D}(t)$

$$\dot{D}(t) = \ddot{q}_{st}(t) \left(\alpha + \beta \int_0^t \frac{dt'}{\dot{q}_{st}^2(t')} \right) + \frac{\beta}{\dot{q}_{st}(t)}$$

conduit à

$$\beta = -\dot{q}_{st}(t_b) \quad ; \quad \alpha = \dot{q}_{st}(t_b) \int_0^{t_b} \frac{dt'}{\dot{q}_{st}^2(t')} \quad (50)$$

On obtient donc pour $D(t)$ la forme plus compacte

$$D(t) = \dot{q}_{st}(t) \dot{q}_{st}(t_b) \int_t^{t_b} \frac{dt'}{\dot{q}_{st}^2(t')} \quad (51)$$

et pour la quantité qui nous intéresse la formule symétrique

$$\lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ N\varepsilon = t_b - t_a}} \varepsilon \det M_N = \dot{q}_{st}(t_a) \dot{q}_{st}(t_b) \int_{t_a}^{t_b} \frac{dt'}{\dot{q}_{st}^2(t')} \quad (52)$$

dans laquelle la fonction \dot{q} est évaluée le long de la trajectoire classique. Nous pourrions alors utiliser le résultat (11) (on a bien sûr $p = m\dot{q}$) pour démontrer la formule

$$\lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ N\varepsilon = t_b - t_a}} \varepsilon \det M_N = -m / \frac{\partial^2 S_{st}}{\partial q_a \partial q_b} \quad (53)$$

d) Calcul approché du spectre au moyen de l'approximation de phase stationnaire

La même méthode permet aussi d'obtenir une estimation des énergies des états liés. Pour cela on considère la quantité (voir formule 32).

$$G(E) = \lim_{\eta \rightarrow +0} \int_0^\infty dt dq e^{\frac{i}{\hbar}(E+i\eta)t} \langle q|t|q_0 \rangle = \sum_n \frac{i\hbar}{E_n - E} \quad (54)$$

dont l'approximation stationnaire s'écrit (le facteur de convergence $\exp.(-\eta t)$ sera désormais implicite)

$$G(E) \simeq \int_0^\infty dt e^{\frac{i}{\hbar}Et} \int dq \sum_{\substack{\text{chemins} \\ \text{classiques}}} \exp \frac{i}{\hbar} S_{st}(q, q, t, 0) \sqrt{\frac{\partial^2 S_{st}}{\partial q \partial q'}} \Big|_{q=q'}$$

On remarque que les chemins classiques considérés dans la somme \sum sont ceux commençant au point q à l'origine des temps et finissant au même point au temps t . On réalise maintenant l'intégrale sur le temps par la méthode de la phase stationnaire c'est-à-dire que pour E et q donné, on recherche les solutions classiques satisfaisant à

$$\frac{\partial}{\partial t} (Et + S_{st}) = 0$$

soit

$$E = - \frac{\partial S_{st}}{\partial t} = H(q, q, t, 0)$$

Cette équation qui doit-être considérée comme une équation en t , nous indique que le temps mis à parcourir l'orbite doit-être choisi de façon à rendre l'énergie classique égale à E . La période t étant ainsi choisie $t \equiv t(E)$. Nous pouvons réaliser l'intégrale jusqu'au second ordre. Nous avons besoin de connaître la dérivée seconde $\partial^2 S_{st} / \partial t^2$ dont nous savons par (10) qu'elle vaut $-\partial E / \partial t$. Nous obtenons donc

$$G(E) = \int dq \sum_{\substack{\text{chemins} \\ \text{classiques}}} \left(\left(\frac{\partial^2 S_{st}}{\partial q \partial q'} \right) \Big|_{q=q'} \frac{\partial t}{\partial E} \right)^{1/2} e^{\frac{i}{\hbar}(Et(E) + S_{st}(q, q, t(E), 0))}$$

qui compte tenu de (51) devient

$$G(E) \approx \int dq \sum \frac{m}{\sqrt{p(q)p(t)}} e^{\frac{i}{\hbar} (Et(E) + S_{qt})} \quad (53)$$

Si nous utilisons une dernière fois l'approximation de la phase stationnaire pour réaliser l'intégrale sur q . Nous obtenons la condition

$$\frac{\partial S_{qt}}{\partial q}(q, q, t, 0) = 0$$

C'est-à-dire (on utilise une fois de plus les relations (10))

$$\left. \frac{\partial S_{qt}}{\partial q_a} \right|_{q_a=q} + \left. \frac{\partial S_{qt}}{\partial q_b} \right|_{q_b=q} = p(t) - p(0) = 0$$

Donc seules les orbites purement périodiques ($q(t) = q(0) = q$, $p(t) = p(0)$) d'énergie E sont à considérer. Celles-ci pourront être groupées en familles telles que dans chaque famille que l'on indexera par la lettre α , chaque orbite corresponde à une même orbite fondamentale parcourue un nombre entier de fois. Si on appelle

$$W_\alpha(E) = Et_\alpha(E) + S_{t\alpha}(E) \quad (56)$$

la phase associée à l'orbite fondamentale de la famille α , On aura

$$G(E) \approx \sum_\alpha \sum_{n=1}^{\infty} N_\alpha(E) e^{\frac{i}{\hbar} n W_\alpha(E)} = \sum_\alpha \frac{N_\alpha(E)}{e^{\frac{i}{\hbar} W_\alpha(E)} - 1} \quad (57)$$

Dans le facteur $N_\alpha(E)$ se trouve inclu le facteur $2m \int dq/p = t_\alpha$ ainsi que les facteurs provenant de l'intégrale gaussienne. On voit donc qu'à l'approximation semi-classique les énergies propres du système qui d'après (54) sont les valeurs de E pour lesquelles $G(E)$ a un pôle sont aussi celles qui entraînent

$$W_\alpha(E) = 2n\pi \quad * \quad (58)$$

Compte tenu de la forme (9) de l'action on voit que cette condition peut aussi s'écrire

$$\oint_\alpha p dq = 2n\pi$$

On retrouve la formule de quantification de Bohr Sommerfeld. Pratiquement la méthode de calcul est la suivante. On cherche les trajectoires périodiques fondamentales en fonction de l'énergie E . On calcule les quantités $W_\alpha(E)$. On change ensuite l'énergie E jusqu'à ce que W_α croise un multiple de 2π . Pour des systèmes à une dimension, on retrouve ainsi l'approximation W.K.B. mais la formule (58) est applicable à des systèmes à plusieurs dimensions pour lesquels elle est non triviale tout en correspondant bien à l'intuition physique.

* Une analyse plus soignée aurait modifiée W_α en $W_\alpha + \pi$ pour tenir compte des réflexions qui ont lieu pour une trajectoire fermée.

e) Applications de la méthode de la phase stationnaire

Après cette longue discussion des méthodes de l'approximation stationnaire il est bon d'en montrer quelques applications. En dehors de nombreux travaux en chimie, il y a eu des applications en physique nucléaire pour traiter des problèmes de diffusion élastique ⁽¹³⁾, d'excitation coulombienne ⁽¹⁴⁾ ainsi que de fission induite par effet coulombien ⁽¹⁵⁾. Le problème est plus complexe que ce que nous avons exposé car les variables q et p ne forment pas un couple de variables conjuguées satisfaisant pour décrire les états asymptotiques du système. Il vaut mieux choisir des coordonnées conjuguées du type action-angle (voir Ref.9) dont l'une d'entre elle possède une limite asymptotique que l'on puisse assimiler à un nombre quantique de niveau (l'énergie par exemple). Sur la figure 8, on peut voir des exemples de résultats pour les sections efficaces classiques de réactions par ions lourds. Dans le cas d'excitation coulombienne le système intrin-

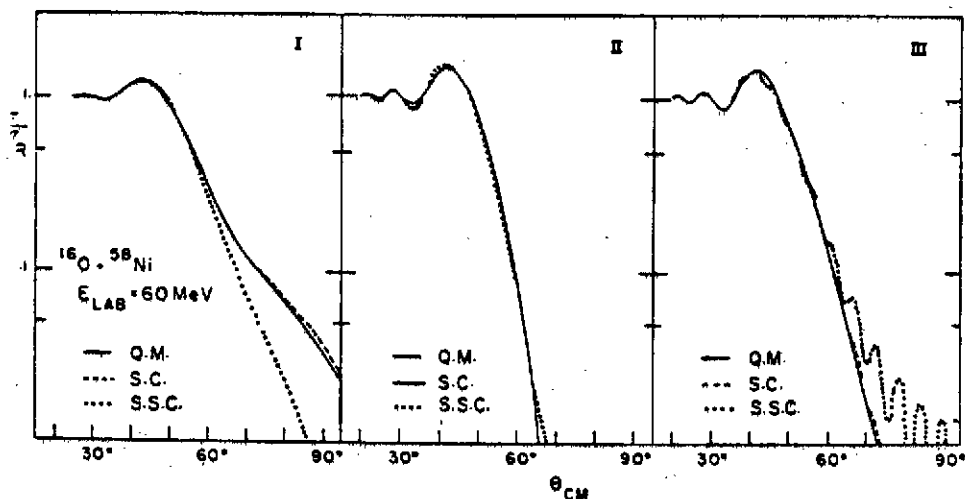


Figure 8 : Comparaison d'un calcul quantique exact (Q.M.) et d'un calcul semi-classique avec des trajectoires complexes (S.C.) (extrait de la référence 13).

sèque est décrit comme un ensemble de vibrateurs et de rotateurs et la trajectoire de l'ion incident peut-être décrite soit classiquement soit de façon semi-classique et couplée à l'excitation. La figure 9 montre une comparaison avec des calculs beaucoup plus complexes (et chers) de voies couplées. Enfin, je voudrais mentionner un exemple de calcul semi-classique de niveaux d'énergie pour un modèle à plusieurs particules. Il s'agit du modèle de Lipkin qui consiste en N particules qui peuvent chacune occuper un des deux niveaux indexés par $\sigma = \pm 1$

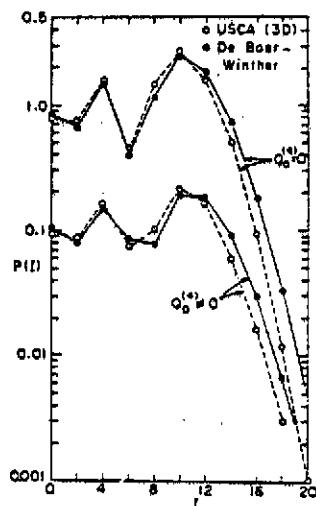


Figure 9 : Probabilité d'excitation coulombienne du niveau de spin I de la bande fondamentale de ^{238}U par de l' ^{40}Ar à $E_{\text{lab}} = 200$ MeV. USCA correspond à l'approximation semi-classique et De Boer et Winter correspond à un calcul quantique de type voies couplées. Q_4 est le moment hexadécapolaire de la bande (Ref 16).

et d'énergie $\sigma E/2$. De plus ces particules sont couplées par une interaction qui peut faire monter ou descendre des paires de nucléons. L'hamiltonien du problème peut s'écrire en seconde quantification sous la forme

$$\hat{H} = \frac{E}{2} \sum_{n=1}^N \sum_{\sigma=\pm 1} \sigma a_{n\sigma}^+ a_{n\sigma} - \frac{V}{2} \sum_{n,n'=1}^N \sum_{\sigma,\sigma'=\pm 1} a_{n-\sigma}^+ a_{n'-\sigma'}^+ a_{n\sigma} a_{n'\sigma'} \quad (60)$$

Il est possible pour ce système de définir une action et donc utiliser les techniques semi-classiques indiquées précédemment. Sur la figure 10, on peut voir une comparaison des énergies semi-classiques obtenues par la relation 59 avec les énergies exactes pour différentes valeurs de l'intensité de l'interaction ($\tilde{E}^{-4} = (N-1)V/E$)¹⁶⁾

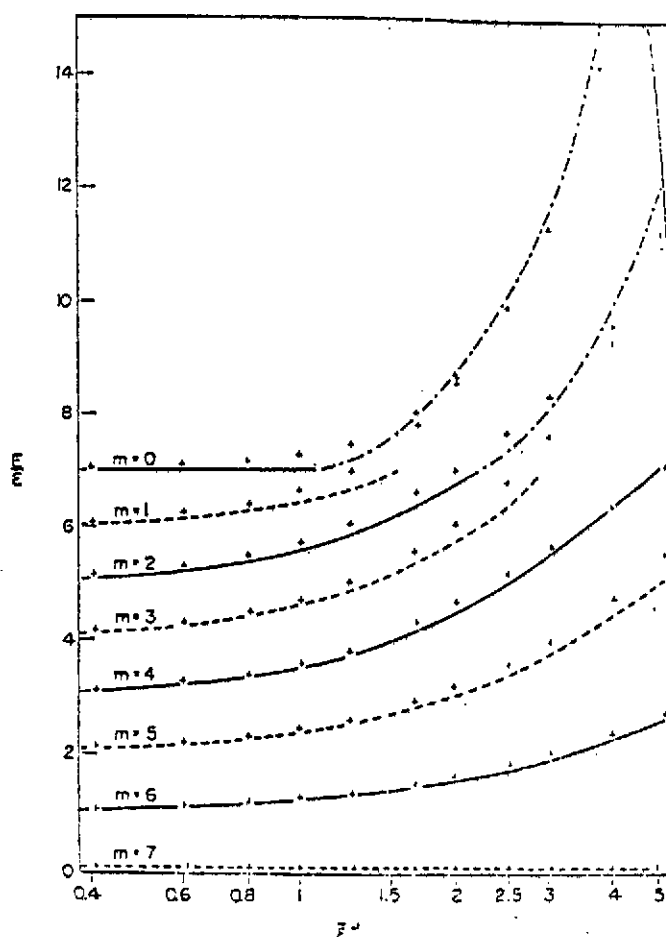


Figure 10 : Comparaison du spectre exact (croix) et de son approximation par la méthode de la phase stationnaire (courbes en trait plein, tiret et point tiret). La quantité \tilde{E}^{-4} mesure l'intensité de l'interaction à 2 corps (voir texte).

6) L'INTEGRALE DE CHEMINS POUR DES SYSTEMES A N CORPS

Nous avons vu que la méthode des intégrales de chemins peut-être considérée comme un outil pour l'étude d'un système quantique à une ou peu de dimensions. Cependant on ne peut manquer de comparer sa grande complexité à la relative simplicité de l'équation de Schrödinger tant en ce qui concerne la résolution analytique de problèmes "simples" que pour le traitement numérique de problèmes plus complexes. Toutefois dès que l'on s'intéresse à des problèmes à plusieurs

corps la compétition devient plus incertaine. Considérons en effet un système à A corps. Une fois éliminé le centre de masse, il nous reste un problème à $3(A-1)$ dimensions (on ne parle pas de spin). Si chaque coordonnée est décrite par une décomposition sur une base de dimension B , la fonction d'onde totale consiste en $B^{3(A-1)}$ nombres. Si on prend l'exemple de l'hélium $A = 4$ et d'une base constituée par un réseau dont le pas vaut 0.05fm et qui s'étend jusqu'à 4fm on aura $B = 80$ soit $80^9 \sim 10^{17}$. Dans la méthode de l'intégrale de chemin on va devoir considérer un ensemble de trajectoires qui, si l'algorithme de Monte-Carlo est bien choisi, sera de l'ordre de $C \sim 1000$. Chacune de ces trajectoires est alors définie par $3(A-1) \times N$ nombres (N est le nombre de pas en temps choisi lors de la discrétisation). Une valeur typique pour N sera 100. Le nombre total de chiffre à manipuler est alors $3(A-1)NC$. Même si l'on considère qu'il faut recommencer un nouveau calcul de Monte-Carlo pour chaque observable que l'on veut évaluer, il faudrait dans l'exemple ci-dessus être intéressé par 10^{11} observables pour rendre les deux méthodes compétitives.

Afin de traiter des problèmes à A corps sans avoir à calculer un trop grand nombre de trajectoires il faut prendre en compte la dépendance rapide du potentiel à deux corps et pour cela introduire dans l'algorithme de calcul une certaine connaissance du résultat final. Ceci peut-être réalisé par l'introduction d'une fonction d'onde d'essai $|\Psi\rangle$ qui soit une approximation raisonnable de celle du fondamental (fonction de Jastrow par exemple). On applique alors la technique des intégrales de chemin au calcul de la quantité

$$\frac{\langle \Psi | \exp(-\tau H) | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \exp(-\tau H) | \Psi \rangle} \quad (61)$$

pour τ suffisamment grand. Le choix de la fonction $|\Psi\rangle$ n'influence pas le résultat mais seulement le temps de calcul. On peut d'ailleurs remarquer que si $|\Psi\rangle$ était justement état propre de H , la quantité ci-dessus (61) serait égale à l'énergie de cet état indépendamment des erreurs numériques effectuées dans le calcul du numérateur et du dénominateur (les mêmes trajectoires étant bien sûr utilisées lors de calcul). Il existe d'autres façons d'influencer le choix de la trajectoire de façon à accélérer les calculs, une des plus usitées est l'échantillonnage préférentiel (importance sampling¹²⁾). Ces méthodes s'appliquent avec succès au calcul des énergies de liaison et d'observables pour des systèmes à peu de nucléons interagissant par des potentiels centraux comme le montrent les figures 11 et 12. Sur la figure 11, on peut voir l'énergie du fondamental de l'Hélium 4 pour le potentiel de Malfliet-Tjon qui consiste en une somme de fonctions de Yukawa attractive et répulsive. Comparé à la valeur exacte (-28 MeV) le résultat est bon. On observe une relaxation très rapide ($\sim 10^{-23}\text{ s}$) du résultat vers la valeur exacte suivie d'un comportement oscillant autour de la valeur exacte. Ces fluctuations reflètent les erreurs statistiques de la méthode de Monte-Carlo et peuvent être réduits par une augmentation du nombre de trajectoires. Sur la figure 12, la densité calculée pour le même système et la même interaction est comparée à la densité exacte.

La méthode évoquée ci-dessus ne permet pourtant pas le calcul des fonctions d'ondes d'états excités (sauf si on connaît exactement les fonctions d'ondes des états d'énergie inférieure) ni (et c'est plus grave pour un physicien nucléaire) le traitement des systèmes de plusieurs fermions. La raison tient à ce qu'il est impossible d'imposer dans l'intégrale de chemin écrite sous sa forme conventionnelle (33) une symétrie exacte comme la symétrie sphérique ou l'antisymétrie globale de la fonction d'onde. Pour la plupart des hamiltoniens la fonction d'onde symétrique du système de bosons possède une énergie inférieure à celle antisymétrique du système de fermions, c'est donc la première qui sera trouvée par la méthode de Monte-Carlo utilisant le

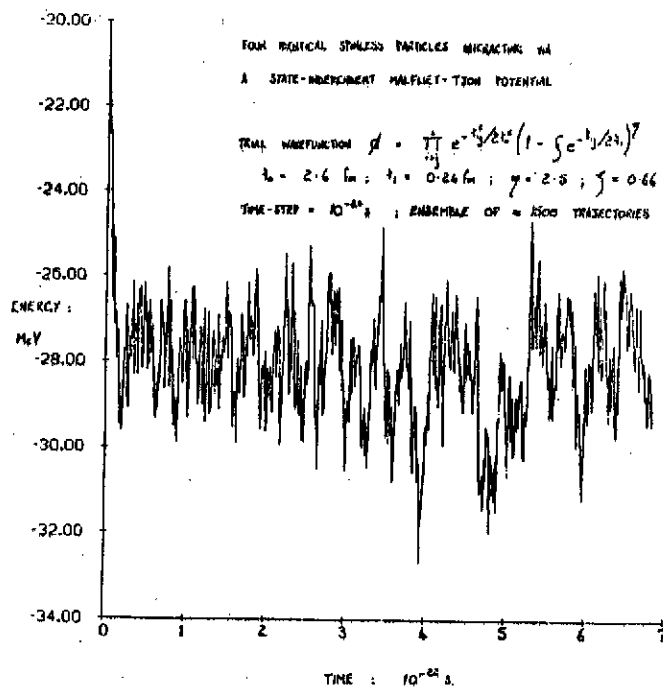


Figure 11 : Energie du noyau He^4 comme fonction de τ pour la fonction d'essai indiquée et le potentiel de Malfiet-Tjon.

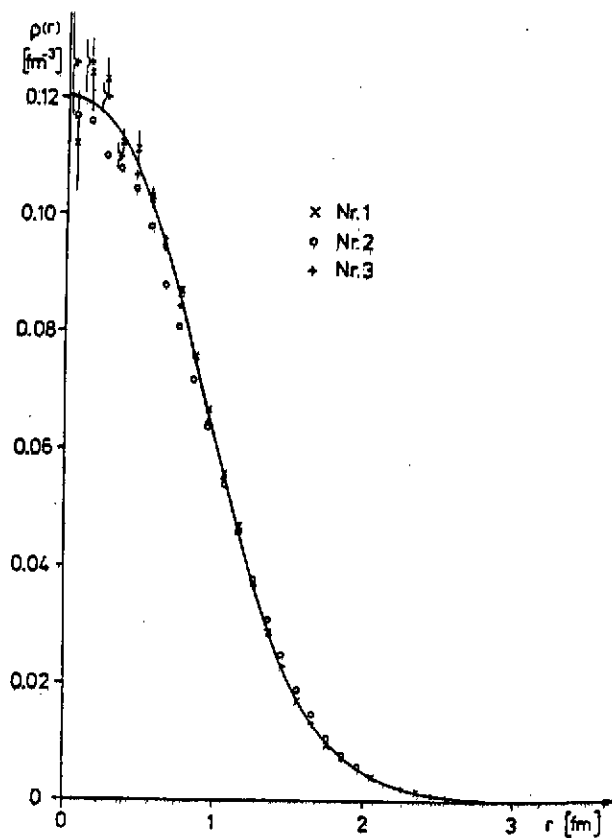


Figure 12 : Densité du noyau He^4 pour le potentiel de Malfiet-Tjon et divers choix d'algorithmes de Monte-Carlo.

temps imaginaire. On a proposé de remédier à ce problème en choisissant une fonction d'essai $|\phi\rangle$ antisymétrique. Mais cette méthode à l'inconvénient d'imposer dès le départ la structure des noeuds. Par ailleurs, elle ne semble pas adaptée lorsque les particules se meuvent dans un espace à plusieurs dimensions. Il faut donc reformuler l'intégrale de chemin en termes de coordonnées contenant explicitement l'antisymétrie inhérente au problème. Parmi les deux types de méthodes proposées, je n'aborderai que celle qui fait du champ moyen la coordonnée sur laquelle est bâtie l'intégrale de chemin. Une autre méthode qui sert de base à des développements bosoniques s'applique à chercher un ensemble de coordonnées qui caractérise de façon unique un point dans l'espace des déterminants de Slater et au moyen d'une décomposition de l'unité appropriée (analogue de 19) bâtissent la probabilité d'évolution comme un intégrale de chemin dans cet espace. Je renvoie aux références 17 et 18 le lecteur intéressé par cette approche.

7) L'INTEGRALE DE CHEMINS DANS L'ESPACE DES COORDONNEES DU CHAMP MOYEN

Dans ce chapitre, je décris une méthode proposée originellement par Stratonovitch²⁰⁾ et reprise par Hubbard²¹⁾. Ce n'est certainement pas la seule méthode de ce type. A bien des égards elle n'est pas optimale car elle manque de souplesse et ne permet par exemple pas d'obtenir le champ moyen de Hartree-Fock ou de Hartree-Fock-Bogoliubov à l'approximation de la phase stationnaire ni de prendre en compte la notion d'interaction effective. Cependant, elle met en oeuvre de façon relativement compacte les techniques nécessaires à l'obtention de meilleures formulations dont la construction implique une discussion technique plus soignée mais relève du même esprit²²⁾.

Deux idées sont à la base de la méthode. La première consiste à remarquer que la complexité du propagateur $\exp(-\frac{i}{\hbar} t \hat{H})$ est due à la présence du potentiel à deux corps dans l'hamiltonien \hat{H} . En effet, grâce aux connaissances acquises par moyen de calculs TDHF, on maîtrise la technologie nécessaire à l'utilisation de propagateurs du type $U_{\sigma}(t) = \exp(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' h(\sigma(t')))$ où $h(\sigma)$ est un opérateur à un corps (énergie cinétique plus potentielle associée au champ moyen σ). On va donc chercher à écrire le propagateur exact comme une intégrale de propagateurs à un corps sur toutes les histoires possibles du champ moyen. L'outil technique utilisé est la complétion quadratique de l'intégrale gaussienne qui s'écrit

$$e^{-\frac{i}{2} a x^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{\sqrt{\frac{2\pi i}{a}}} e^{i a \frac{y^2}{2}} e^{-i a x y} \quad (62)$$

On remarque que dans cette égalité nous avons remplacé l'exponentielle d'une quantité quadratique en x par l'intégrale sur y de l'exponentielle d'une quantité linéaire en x multipliée par la fonction de poids $\exp(-i a y^2/2)$. On va donc écrire l'énergie potentielle à deux corps comme le carré d'un opérateur à un corps (x dans la formule 62) ce qui nous permettra d'utiliser la transformation 62 le rôle de y étant tenu par une quantité qui pourra alors s'assimiler à un champ moyen. Il y a une infinité de façon de réaliser l'écriture du potentiel à deux fermions comme le carré d'un opérateur à un corps. Aucune ne conduit à Hartree-Fock comme trajectoire stationnaire. Je choisirai donc celle qui à l'approximation de la phase stationnaire, donne le potentiel de Hartree²³⁾ (plutôt que celui de Fock ou la moitié de Hartree-Fock par exemple).

Nous partons du hamiltonien

$$\hat{H} = \sum_{ij} T_{ij} a_i^\dagger a_j + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} V_{ijkl} a_i^\dagger a_k^\dagger a_l a_j \quad (63)$$

où $T_{ij} = \langle i | \hat{T} | j \rangle$ sont les éléments de matrice de l'énergie cinétique et $V_{ijkl} = \langle ikl | \hat{V} | j \rangle$ sont les éléments de matrice non antisymétrisés du potentiel. Compte tenu des règles d'anticommutation de Fermions, on peut aussi écrire sous la forme

$$\hat{H} = \sum_{ij} K_{ij} \hat{P}_{ij} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} V_{ijkl} \hat{P}_{ij} \hat{P}_{kl} \quad (64)$$

avec

$$K_{ij} = T_{ij} + \frac{1}{2} \sum_k V_{ikkk} \quad (65)$$

et

$$\hat{P}_{ij} = a_i^\dagger a_j \quad (66)$$

Dans la formule (64) on a mis l'énergie potentielle sous forme quadratique en \hat{P}_{ij} . La formule (62) se généralise à une forme quadratique de dimension D :

$$\exp\left(-\frac{i\varepsilon}{2} \sum_{\alpha,\beta=1}^D a_{\alpha\beta} x_\alpha x_\beta\right) = (\det \alpha)^{1/2} \iint \frac{\prod d y_k}{\sqrt{2\pi i/\varepsilon}} \exp\left\{\frac{i\varepsilon}{2} \sum_{\alpha,\beta} a_{\alpha\beta} (y_\alpha y_\beta - 2 y_\alpha x_\beta)\right\} \quad (67)$$

Nous pouvons donc l'utiliser pour notre construction. Le rôle des indices α et β de la formule 67 est tenu par les paires d'indices (ij) et (kl) et celui de la matrice $a_{\alpha\beta} = a(ij)(kl)$ par V_{ijkl} . On arrive à

$$\exp\left(-\frac{i\varepsilon}{h} \hat{H}\right) = \mathcal{N} \iint \prod_{(ij)} d\sigma_{ij} \exp\left\{\frac{i\varepsilon}{2} \sum_{ijkl} V_{ijkl} \sigma_{ij} \sigma_{kl}\right\} U_\sigma(\varepsilon) \quad (68)$$

avec

$$U_\sigma(\varepsilon) = \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{h} \sum_{ij} h_{ij}(\sigma) \hat{P}_{ij}\right) \quad (69)$$

et

$$h_{ij}(\sigma) = K_{ij} + \sum_{kl} V_{ijkl} \sigma_{kl} \quad (70)$$

En toute rigueur, nous avons triché en écrivant (68) car nous avons assimilé les opérateurs \hat{P}_{ij} aux nombres x_α de la formule 67, négligeant ainsi le fait qu'ils ne commutent pas. Cependant, une analyse soignée montre que l'erreur engendrée est d'ordre ε^2 et de même que lors de la dérivation de la formule (30) elle devient négligeable au passage $\varepsilon \rightarrow 0, N\varepsilon = \text{const}$. Le facteur de normalisation \mathcal{N} est celui qui assure que pour $\hat{H}=0$ on retrouve bien l'unité. Maintenant, il ne nous reste qu'à discrétiser le temps comme précédemment en intervalles de largeur ε , à réaliser la décomposition (68) pour chaque temps $t_n = n\varepsilon$, $n = 1-N$, et à "empiler" les propagateurs infinitésimaux ainsi obtenus. Le résultat s'écrit

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right) = \mathcal{N} \int \prod_{(i,j) \in n} d\sigma_{ij}(n) \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^N \sum_{i,j,k,l} V_{ijkl} \sigma_{ij}(n) \sigma_{kl}(n)\right\} U_{\sigma}(t) \quad (71)$$

avec

$$U_{\sigma}(t) = T \prod_{n=1}^N \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \sum_{i,j} h_{ij}(\sigma(n)) \hat{p}_{ij}\right) \quad (72)$$

où le symbole T rappelle que l'on doit respecter l'ordre dans le temps lorsque l'on effectue le produit (72). Une écriture commode (mais parfois dangereuse) de (71) (72) est

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right) = \int \mathcal{D}[\sigma] \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt (\sigma(t) \vee \sigma(t))\right\} U_{\sigma}(t) \quad (73)$$

$$U_{\sigma}(t) = T \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt (h(t) \hat{p})\right) \quad (74)$$

Maintenant que nous avons l'outil (71)-(74) voyons ce que nous pouvons en faire. L'utilisation analytique semblant improbable dans les cas d'intérêt, il reste soit le calcul numérique d'une intégrale utilisant le propagateur et bien sûr avec $t \rightarrow -i\epsilon$, soit la construction d'approximations.

La première application est précisément celle qui est actuellement tentée (sous cette forme ou des variantes) pour résoudre exactement le problème à N fermions. On remarque en effet que l'intégrale de chemin (71) tient compte à tout instant de l'antisymétrisation des fermions. La procédure de calcul consiste à choisir par des méthodes de type Monte-Carlo un ensemble de chemin $\sigma_{ij}(t_n)$ puis de calculer l'évolution d'une fonction d'essai $|\Psi\rangle$ par l'opérateur de type TDHF (72) (74). A chaque chemin correspondra un calcul de type TDHF (moins la selfconsistence car σ est donné a priori). C'est le prix à payer pour un résultat exact ; il est lourd mais cependant raisonnable par comparaison avec celui que requerraient des calculs exacts par la diagonalisation de matrices (dimension 10^{17}). Une autre difficulté viendra aussi de ce que la fonction d'essai $|\Psi\rangle$ (formule 6) devra probablement être choisie comme une somme de déterminants de Slater, si l'on veut tenir compte des effets des corrélations pour ne pas trop augmenter le nombre de trajectoires nécessaires au calcul.

8) UNE APPROXIMATION DE TYPE CHAMP MOYEN POUR LA MATRICE S

Dans ce chapitre, nous allons dériver une approximation de l'élément de matrice $\langle f | \exp(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t) | i \rangle$ entre deux états initial et final. Partant de 73 on écrit l'expression exacte

$$\langle f | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} | i \rangle = \int \mathcal{D}[\sigma] \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^t (\sigma \vee \sigma) dt\right) \langle f | U_{\sigma} | i \rangle = \int \mathcal{D}[\sigma] \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(\sigma)\right) \quad (75)$$

dans laquelle on a introduit l'action

$$S(\sigma) = \frac{1}{2} \int_0^t dt \sum_{i,j,k,l} V_{ijkl} \sigma_{ij}(t) \sigma_{kl}(t) - i \hbar \ln \langle f | U_{\sigma}(t) | i \rangle \quad (76)$$

On peut maintenant chercher le champ $\sigma_{ij}(t)$ qui rend l'action stationnaire. La variation s'effectue comme suit

$$\delta S = \int_0^t dt' \sum_{ijkl} V_{ijkl} \sigma_{ji}(t') \delta \sigma_{lk}(t') - i\hbar \frac{\delta \langle g | U_\sigma | i \rangle}{\langle g | U_\sigma | i \rangle} \quad (77)$$

et on a

$$\delta \langle g | U_\sigma | i \rangle = - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \sum_{ijkl} V_{ijkl} \delta \sigma_{lk}(t') \langle g | U_\sigma(t, t') \hat{P}_{ij} U_\sigma(t', 0) | i \rangle \quad (78)$$

soit

$$\delta S = \int_0^t dt' \sum_{ijkl} V_{ijkl} \delta \sigma_{lk}(t') \left\{ \sigma_{ji}(t') - \frac{\langle g | U_\sigma(t, t') \hat{P}_{ij} U_\sigma(t', 0) | i \rangle}{\langle g | U_\sigma(t, 0) | i \rangle} \right\} \quad (79)$$

comme la variation $\delta \sigma_{lk}(t')$ est arbitraire on en déduit que l'accolade doit être nulle pour tous les indices ij (cela implique bien sûr qu'à V_{ijkl} corresponde une matrice a inversible. Le résultat s'écrit alors

$$\sigma_{ji}^0(t') = \frac{\langle g(t') | a_{ij}^+ | i(t') \rangle}{\langle g(t') | i(t') \rangle} \quad (80)$$

formule dans laquelle nous avons introduit la notation

$$\begin{aligned} |i(t')\rangle &= U_{\sigma^0}(t', 0) |i\rangle \\ |g(t')\rangle &= U_{\sigma^0}(t', 0) |g\rangle \end{aligned} \quad (81)$$

La self consistance du problème se voit à ce que $\sigma^0(t')$ dépend des états $|i(t')\rangle, |g(t')\rangle$ qui sont eux mêmes obtenus au moyen d'opérateurs d'évolution U_{σ^0} dépendant de $\sigma^0(U_{\sigma^0}(t'), U_{\sigma^0}(t', 0))$. Une fois résolu le problème (80)-(81) par une généralisation des techniques numériques de TDHF on obtient une approximation de l'élément de matrice S

$$\langle g | U(t) | i \rangle \approx \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \sum_{ijkl} V_{ijkl} \sigma_{lk}^0(t') \sigma_{ji}^0(t') \right\} \langle g | U_{\sigma^0}(t, 0) | i \rangle \quad (82)$$

Je ne discuterai pas ici diverses variantes ²⁴⁾ de l'approximation qui en particulier permettent de résoudre le problème de l'asymptoticité (que se passe-t-il quand l'intervalle $[0, t]$ est étendu à $]-\infty, \infty[$). Avant de présenter des résultats je mentionnerai seulement comment TDHF apparaît comme cas particulier des équations (80), (81). Ce sera le cas pour lequel $|i\rangle$ et $|g\rangle$ sont choisis comme des déterminants de Slater vérifiant $|i(t')\rangle \equiv |g(t')\rangle$. En d'autres termes, si partant d'un déterminant de Slater $|i\rangle$, on l'évoque par les équations TDHF "ordinaires" jusqu'au temps t et que l'on appelle $|f\rangle$ l'état obtenu, le champ moyen de TDHF sera solution des équations (80) (81) bâties sur les états $|i\rangle$ et $|f\rangle$ ainsi définis

La première application des équations ci-dessus, a été faite pour le hamiltonien de Lipkin (50) en présence d'une perturbation à un corps dépendante du temps

$$V(t) = \exp(-t^2) \sum_{n \neq 0, \sigma = \pm 1}^N (a_{n\sigma}^+ a_{n-\sigma} + \frac{\sigma}{2} a_{n\sigma}^+ a_{n\sigma}) \quad (83)$$

On calcule les transitions engendrées par cette perturbation du fondamental vers les états excités. La figure (13) montre trois comparaisons avec les résultats d'un calcul exact. La figure 14,

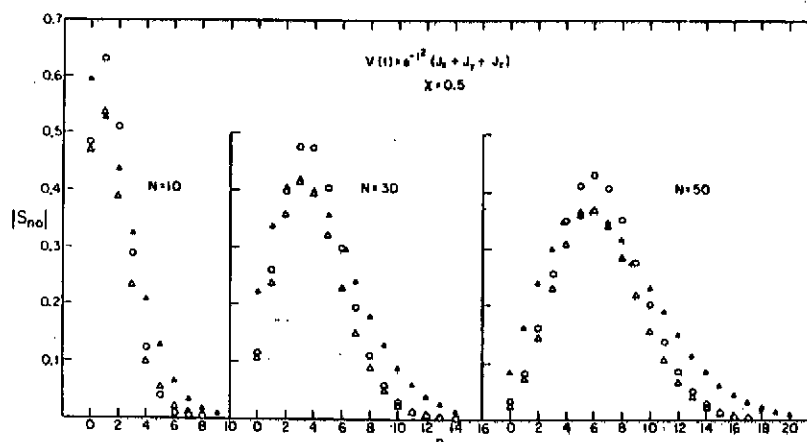


Figure 13 : Amplitude d'excitations S_{no} pour le modèle de Lipkin en présence de champ extérieur (indiqué en haut de la figure). \circ -résultats exacts ; Δ approximation de champ moyen \times -évolution par l'hamiltonien TDHF, Ref.24

se singularise dans cet exposé ; en effet elle montre une comparaison avec des résultats expérimentaux. Il s'agit d'expériences d'ionisation de l'Hélium par des protons²⁵. Les mouvements des noyaux sont traités classiquement et ceux des électrons quantiquement. On constate que la méthode de champ moyen semi-classique pour la matrice S reproduit bien les données expérimentales. Les résultats d'un calcul utilisant une méthode traditionnelle en physique moléculaire donnent une idée de la difficulté qu'il y a à reproduire les données.

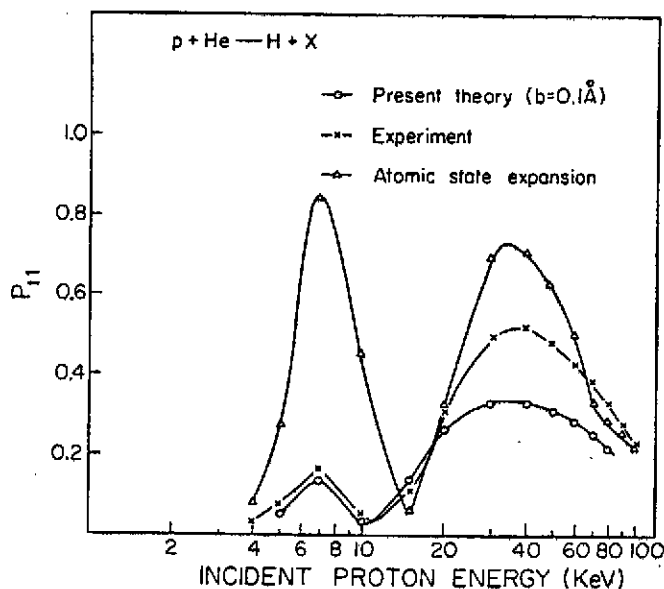


Figure 14 : Probabilité de transfert de charge inclusif dans la réaction atomique $p + He$; "present theory" indique le résultat de l'approximation de champ moyen.

9) CONCLUSION

Je pense avoir démontré que la méthode des intégrales de chemin est non seulement un outil conceptuel puissant mais encore qu'elle offre une des chances les plus prometteuses de calculer exactement les propriétés de l'état fondamental voire des premiers états excités du problème à

N corps. Par ailleurs elle se prête naturellement à des approximations basées sur la méthode de la phase stationnaire. Ces approximations fournissent souvent une bonne reproduction des données expérimentales. De plus (je n'ai pas discuté ce point) elles constituent la base de départ d'un traitement perturbatif du problème quantique autour de la solution classique.

LECON III

UN PRINCIPE VARIATIONNEL POUR LA MESURE DE LA VALEUR MOYENNE D'UNE OBSERVABLE ET DE SA DISPERSION

1) CARACTERISTIQUES GENERALES DU PRINCIPE VARIATIONNEL

Dans cette leçon, je présenterai un principe variationnel adapté à la description de processus de mesure d'une observable sur un système préparé antérieurement.²⁴⁾ J'en décrirai ensuite une modification qui aura pour but d'adapter le principe à la détermination de la dispersion des résultats de la mesure d'une observable. La motivation de cet effort tient à une remarque de la leçon I affirmant que TDHF n'est pas adapté au calcul de dispersions. Il s'agit donc de remédier à ce défaut tout en conservant des équations assez simples pour être résolues. Deux constatations déduites de l'expérience sont à cet égard encourageantes. On remarque d'abord qu'un grand nombre de données peuvent s'expliquer au moyen de modèles qui utilisent la notion de température. Celle-ci est absente de TDHF mais il est possible de l'inclure dans une théorie de type champ moyen. Pour ce faire on peut décrire le système par une matrice densité non corrélée $\exp(\sum_j R_{ij} a_i^\dagger a_j)$ et si la notion de température T a un sens on aura de plus $R_{ij} = \frac{1}{kT} h_{ij}$ où h est l'hamiltonien à un corps. L'autre constatation concerne les observables mesurées dans les expériences : ce sont presque exclusivement des observables à un corps (énergie cinétique = impulsion, angle, nombre de masse ou de charge). Bien que la mesure de la dispersion d'une observable à 1 corps s'apparente à celle d'un opérateur à 2 corps le problème est toutefois plus simple puisque le nombre de degrés de liberté reste égal au nombre d'éléments de matrice de l'opérateur à 1 corps. Quand on étudie une dispersion on doit donc s'attendre à des équations plus complexes que pour une valeur moyenne, mais pas à une augmentation de la taille de l'espace dans lequel les équations doivent être résolues. En d'autres termes, la matrice densité à un corps (quantité à 2 indices Leçon I formule 3) reste l'objet fondamental de notre étude alors même qu'on ne peut plus lui associer une fonction de déterminant de Slater

Avant de dériver les équations de type champ moyen, nous allons présenter et étudier le principe variationnel qui sera à leur origine. On peut établir un certain nombre de critères que devrait satisfaire un principe adapté à la mesure d'une observable

- 1) La description quantique d'un processus de mesure implique deux objets mathématiques : un opérateur correspondant à l'observable et une matrice densité qui décrit le système*. L'emploi d'un opérateur et d'une matrice densité comme quantités variationnelles apparaît donc comme une exigence naturelle.
- 2) Dans une expérience, on prépare le système à un instant initial t_i . Sa matrice densité D est parfaitement spécifiée à cet instant. Si on dénote $\mathcal{D}(t)$ la matrice densité d'essai de principe celle-ci doit donc satisfaire à la condition

* Le choix d'une matrice densité semble préférable à celui d'une fonction d'onde (qu'il englobe d'ailleurs) car il permet une description cohérente de problèmes comme celui de la mesure successive de deux observables quand on n'observe pas le résultat de la première mesure.

$$\mathcal{D}(t_i) = D \quad (1)$$

La matrice densité exacte D évolue ultérieurement selon l'équation de Von Neuman

$$i \hbar \dot{\mathcal{D}}(t) = [H, \mathcal{D}] \quad (2)$$

jusqu'à un temps final $t_f > t_i$. A cet instant on effectue un processus de mesure au moyen d'un appareillage que l'on décrit par un opérateur A . Si on dénote $\mathcal{A}(t)$ l'opérateur variationnel du principe et on devra donc avoir

$$\mathcal{A}(t_f) = A \quad (3)$$

En d'autres termes une variation de \mathcal{A} et \mathcal{D} compatible avec la nature du processus de mesure doit satisfaire

$$\delta \mathcal{D}|_{t_i} = 0 \quad \delta \mathcal{A}|_{t_f} = 0 \quad (4)$$

3) L'utilité d'un principe variationnel se manifeste surtout quand on l'utilise dans le cadre d'une approximation (dans un espace variationnel réduit). Cependant pour qu'il ait quelque chance de décrire correctement le processus d'une mesure il se doit de conduire aux équations exactes du mouvement (Schroedinger) pour la variation la plus générale de \mathcal{D} et de \mathcal{A} .

4) Il apparaît finalement souhaitable que la valeur stationnaire de l'action possède un sens physique et plus précisément celui de la quantité même pour l'évaluation de laquelle le principe est construit : le résultat de la mesure. On peut remarquer que cette exigence satisfaite en mécanique et optique géométrique, ne l'est pas par le principe de Schroedinger mentionné dans la leçon I. On vérifie facilement que dans ce dernier cas l'insertion des solutions du problème (aussi bien dans le cas exact que dans l'application à TDHF) conduit à une action stationnaire nulle.

2) PRINCIPE VARIATIONNEL POUR LA VALEUR MOYENNE D'UN OBSERVABLES-EQUATIONS-SYMETRIES

Nous allons vérifier que les critères énoncés ci-dessus sont bien satisfaits par l'action S_1 suivante,

$$S_1 = \left. \frac{\text{Tr} \mathcal{A} \mathcal{D}}{\text{Tr} \mathcal{D}} \right|_{t_i}^{t_f} - \int_{t_i}^{t_f} dt \text{Tr} \mathcal{A} \left(\frac{d}{dt} \frac{\mathcal{D}}{\text{Tr} \mathcal{D}} + i [H, \frac{\mathcal{D}}{\text{Tr} \mathcal{D}}] \right) \quad (5)$$

quand les variations de \mathcal{A} et \mathcal{D} sont contraintes par

$$\delta \mathcal{A}|_{t_f} = 0 \quad \delta \mathcal{D}|_{t_i} = 0 \quad (6)$$

Dans l'équation (5) H est l'hamiltonien (quantique) et Tr signifie que l'on calcule la trace dans l'espace complet (espace de Fock) des états à 1, 2, ... n particules dans lequel \mathcal{A} et \mathcal{D} agissent. Derrière la complexité apparente de l'action (5) on reconnaît une structure proche de celle de l'action classique (Leçon II formule 9) \mathcal{A} jouant le rôle d'impulsion et $\mathcal{D}/\text{Tr} \mathcal{D}$ celui de coordonnée. Le contre terme final résulte des conditions (6). Un tel contre terme apparaîtrait aussi dans le principe de Hamilton pour des conditions aux limites mixtes ($q(t_i), p(t_f)$). Il est commode d'introduire la notation

$$\tilde{\mathcal{Q}} \equiv \mathcal{Q} / \text{Tr } \mathcal{Q} \quad (7)$$

La variation de \mathcal{A} et \mathcal{Q} dans un espace variationnel qu'il n'est pas besoin de préciser pour l'instant, conduit alors aux équations

$$\text{Tr } \delta \mathcal{A} \left(\frac{d\tilde{\mathcal{Q}}}{dt} + i [\mathcal{H}, \tilde{\mathcal{Q}}] \right) = 0 \quad (8a)$$

$$\text{Tr } \delta \mathcal{Q} \left\{ \frac{d\mathcal{A}}{dt} + i [\mathcal{H}, \mathcal{A}] - \text{Tr}(\tilde{\mathcal{Q}} \left(\frac{d\mathcal{A}}{dt} + i [\mathcal{H}, \mathcal{A}] \right)) \right\} = 0 \quad (8b)$$

On peut aussi écrire ces équations sous la forme

$$\begin{aligned} \delta_{\mathcal{A}} \text{Tr } \mathcal{A} \left(\frac{d\tilde{\mathcal{Q}}}{dt} + i [\mathcal{H}, \tilde{\mathcal{Q}}] \right) &= 0 \\ \delta_{\mathcal{Q}} \text{Tr } \tilde{\mathcal{Q}} \left(\frac{d\mathcal{A}}{dt} + i [\mathcal{H}, \mathcal{A}] \right) &= 0 \end{aligned} \quad (9)$$

où les symboles $\delta_{\mathcal{A}}$, $\delta_{\mathcal{Q}}$ signifient que les quantités auxquelles ils s'appliquent doivent être variées par rapport aux seuls coefficients définissant \mathcal{A} ou \mathcal{Q} . On peut remarquer que pour des espaces variationnels arbitraires de \mathcal{A} et \mathcal{Q} , rien ne garantit a priori l'existence de solutions aux équations (8)(9). Il sera donc toujours nécessaire de la vérifier. Nous supposons désormais que tel est bien le cas.

Les équations variationnelles ci-dessus ont un certain nombre de propriétés que nous allons maintenant passer en revue. Tout d'abord nous allons chercher un espace variationnel qui garantisse la propriété 4) mentionnée dans le chapitre précédent (l'action stationnaire S_1 est égale à la valeur moyenne de l'observable A mesurée au temps t_f^*). On constate que si l'espace où évolue \mathcal{A} est tel que des variations $\delta \mathcal{A}$ proportionnelles à \mathcal{A} sont permises l'équation (8) devient

$$\text{Tr } \mathcal{A} \left(\frac{d\tilde{\mathcal{Q}}}{dt} + i [\mathcal{H}, \tilde{\mathcal{Q}}] \right) = 0 \quad (10)$$

Revenant alors à la définition de l'action on trouve

$$S_1(\text{stationnaire}) = \text{Tr } \mathcal{A} \tilde{\mathcal{Q}}|_{t_f} = \text{Tr } A \tilde{\mathcal{Q}}|_{t_f} \quad (11)$$

qui est ce que nous souhaitons. Nous supposons désormais que tous les espaces variationnels choisis pour \mathcal{A} permettent des variations infinitésimales $\delta \mathcal{A} \propto \mathcal{A}$. Il est facile de voir que les espaces variationnels les plus intéressants (opérateurs à un ou plusieurs corps) sont de ce type.

Nous devons aussi vérifier le point 3) de l'introduction en étudiant la variation la plus générale de \mathcal{A} et \mathcal{Q} . L'équation 8a conduit bien à l'équation d'évolution exacte pour la densité normalisée

$$\frac{d\tilde{\mathcal{Q}}}{dt} + i [\mathcal{H}, \tilde{\mathcal{Q}}] = 0 \quad (12)$$

On remarque que par suite de l'invariance de l'action vis à vis de la transformation de jauge

* Si l'espace variationnel de \mathcal{A} ou \mathcal{Q} est restreint il ne pourra bien sûr s'agir que d'une approximation de la valeur moyenne mesurée. Il n'y a pas de miracle !

$$\mathcal{D}(t) \rightarrow \exp f(t) \cdot \mathcal{D}(t) \quad f(t_i) = 0 \quad (13)$$

nous n'avons aucune information sur l'évolution de la norme de \mathcal{D} (la fonction de partition $Z = \text{Tr} \mathcal{D}$) mais bien sûr cette incertitude n'affecte pas l'action, donc le résultat de la mesure. En introduisant la notation

$$\tilde{\mathcal{A}} = \mathcal{A} - \text{Tr} \mathcal{A} \tilde{\mathcal{D}} \quad (14)$$

nous dérivons de l'équation (8b) l'équation d'évolution pour

$$\frac{d\tilde{\mathcal{A}}}{dt} + i [\mathcal{H}, \tilde{\mathcal{A}}] = 0 \quad (15)$$

Cette équation nous montre, qu'à une constante près, l'évolution temporelle de \mathcal{A} est celle dictée par l'équation de Schrödinger. On peut remarquer que $\mathcal{A}(t)$ ne doit pas être identifiée avec un opérateur de la représentation de Schroedinger (qui est constant). Si on l'écrit plutôt sous la forme $\mathcal{A}(t_f, t)$ on constate qu'il obéit à l'équation de Heisenberg vis à vis du temps t_f et à celle de Schroedinger vis à vis du temps t . Le fait que \mathcal{A} ne soit connu qu'à une constante près n'affecte bien sûr pas le résultat de la mesure car au temps t_f justement on a une connaissance complète de $\mathcal{A}(t_f) \equiv A$. On peut relier cette indétermination de \mathcal{A} à une autre symétrie de jauge de l'action

$$\mathcal{A}(t) \rightarrow \mathcal{A}(t) + g(t) \quad g(t_f) = 0 \quad (16)$$

où $g(t)$ est une fonction (un \mathbb{C} nombre) arbitraire. Le moyen le plus simple de l'éliminer consiste à imposer

$$\frac{d}{dt} \text{Tr} \mathcal{A} \tilde{\mathcal{D}} = 0 \quad (17)$$

L'équation (15) devient alors l'équation exacte

$$\frac{d\mathcal{A}}{dt} + i [\mathcal{H}, \mathcal{A}] = 0$$

On peut enfin mentionner que quelques soient les espaces variationnels de \mathcal{A} et \mathcal{D} , il existe un invariant associé à l'invariance de l'action par translation dans le temps. Pour dériver cet invariant le plus simple est de considérer les équations 8a, 8b pour les variations

$$\delta \mathcal{A} = \frac{d\mathcal{A}}{dt} \delta t \quad \delta \mathcal{D} = \frac{d\mathcal{D}}{dt} \delta t \quad (18)$$

qui caractérisent l'évolution le long de la trajectoire. Une simple soustraction montre alors que la quantité

$$\mathcal{E}_1 = -i \text{Tr} \mathcal{A} [\mathcal{H}, \tilde{\mathcal{D}}] \quad (19)$$

se conserve lors de l'évolution. On peut d'ailleurs remarquer que l'analogie de l'action S_1 avec celle du principe de Hamilton met justement \mathcal{E}_1 en correspondance avec le hamiltonien classique.

3) MODIFICATION DU PRINCIPE POUR LE CALCUL DES DISPERSIONS

Pour un choix donné des espaces variationnels de \mathcal{A} et \mathcal{D} nous avons déterminé une réponse "optimale" au problème de la mesure au temps t_f de la valeur moyenne $\langle A \rangle$ et nous avons vérifié

que

$$S_2(\text{stationnaire}) = \langle A \rangle \quad (20)$$

Dans une étape ultérieure nous voudrions utiliser les mêmes espaces pour obtenir une valeur optimale de la dispersion Δ de l'opérateur A au même temps t_f autour de $\langle A \rangle$. Pour ce faire nous considérons l'action

$$S_2 = \text{Tr} \tilde{\mathcal{A}}^2 \tilde{\mathcal{Q}} \Big|_{t_i}^{t_f} - \int_{t_i}^{t_f} dt \text{Tr} \tilde{\mathcal{A}}^2 \left(\frac{d\tilde{\mathcal{Q}}}{dt} + i [H, \tilde{\mathcal{Q}}] \right) \quad (21)$$

où $\tilde{\mathcal{Q}}$ et $\tilde{\mathcal{A}}$ sont définis par les formules (7) et (14). Les équations du mouvement s'obtiennent en rendant stationnaire S_2 pour des variations $\delta \mathcal{A}$, $\delta \mathcal{Q}$ soumises aux contraintes (en plus bien sûr de celles que leur imposent leurs espaces variationnels respectifs).

$$\delta \mathcal{A} \Big|_{t_i} = 0 \quad \delta \mathcal{Q} \Big|_{t_i} = 0 \quad (22)$$

La variation quoique plus pénible se fait comme dans le chapitre précédent. On obtient alors les équations

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{A} \text{Tr} \tilde{\mathcal{A}}^2 \left(\frac{d\tilde{\mathcal{Q}}}{dt} + i [H, \tilde{\mathcal{Q}}] \right) &= 0 \\ \delta \mathcal{Q} \text{Tr} \tilde{\mathcal{Q}} \left(\frac{d\tilde{\mathcal{A}}^2}{dt} + i [H, \tilde{\mathcal{A}}^2] \right) &= 0 \end{aligned} \quad (23)$$

Si on veut mettre en évidence plus directement les variations et on peut récrire les équations (23) sous la forme

$$\text{Tr} \delta \mathcal{A} \left[\left\{ \mathcal{A}, \left(\frac{d\tilde{\mathcal{Q}}}{dt} + i [H, \tilde{\mathcal{Q}}] \right) \right\}_+ - \tilde{\mathcal{Q}} \left(\text{Tr} \tilde{\mathcal{A}} \left(\frac{d\tilde{\mathcal{Q}}}{dt} + i [H, \tilde{\mathcal{Q}}] \right) \right) - \left(\frac{d\tilde{\mathcal{Q}}}{dt} + i [H, \tilde{\mathcal{Q}}] \right) \text{Tr} \tilde{\mathcal{A}} \tilde{\mathcal{Q}} \right] = 0 \quad (24)$$

$$\text{Tr} \left(\delta \mathcal{Q} - \tilde{\mathcal{Q}} \text{Tr}(\delta \mathcal{Q}) \right) \left[\frac{d\tilde{\mathcal{A}}^2}{dt} + i [H, \tilde{\mathcal{A}}^2] + \tilde{\mathcal{A}} \text{Tr} \tilde{\mathcal{A}} \left(\frac{d\tilde{\mathcal{Q}}}{dt} + i [H, \tilde{\mathcal{Q}}] \right) \right] = 0 \quad (25)$$

(l'accolade avec un signe + indique un anticommutateur).

On vérifie aisément que le choix d'un espace permettant la solution $\delta \mathcal{A} \propto \mathcal{A}$ entraîne

$$\text{Tr} \tilde{\mathcal{A}}^2 \left(\frac{d\tilde{\mathcal{Q}}}{dt} + i [H, \tilde{\mathcal{Q}}] \right) = 0 \quad (26)$$

qui a pour conséquence

$$S_2(\text{stationnaire}) = \text{Tr} \tilde{\mathcal{A}}^2 \tilde{\mathcal{Q}} \Big|_{t_i}^{t_f} = \Delta \quad (27)$$

De même on trouve un invariant associé à l'invariance de l'action S_2 par translation temporelle

$$\mathcal{E}_2 = \text{Tr} \tilde{\mathcal{A}}^2 [H, \tilde{\mathcal{Q}}]$$

La variation la plus générale de \mathcal{A} et \mathcal{Q} conduit à des équations dont il est aisé de voir qu'elles sont satisfaites par les équations exactes du mouvement.

4) APPLICATION AU CALCUL DE LA VALEUR MOYENNE ET DE LA DISPERSION DES MESURES D'UN OBSERVABLE A UN CORPS

Après avoir étudié les caractéristiques générales des équations associées aux actions et nous allons considérer le cas particulier où $\mathcal{A}(t)$ (donc A) ne peut varier que dans l'espace des opérateurs à un corps

$$\mathcal{A} = \frac{a}{2} + \sum_{ij} B_{ij} a_i^\dagger a_j \quad (28)$$

Dans la définition (28) on voit apparaître les paramètres qui définissent \mathcal{A} c'est à dire le nombre a et les éléments de la matrice $\{B_{ij}\}$

Pour l'espace variationnel de \mathcal{D} nous choisissons celui des matrices densité non corrélées

$$\mathcal{D} = p \exp \sum_{ij} R_{ij} a_i^\dagger a_j \quad (29)$$

qui ainsi qu'il a été mentionné dans l'introduction peut, entre autres, décrire un système de nucléons placés dans un champ moyen à une température donnée.

Dans la définition (29) p et $\{R_{ij}\}$ sont les paramètres qui définissent \mathcal{D} . En fait toute matrice densité de ce type peut être mise en correspondance univoque avec l'ensemble de nombres constitué par la fonction de partition Z et la matrice densité $\{\rho_{ij}\}$ défini par

$$\text{Tr } \mathcal{D} = Z \quad (30)$$

$$\text{Tr } (a_i^\dagger a_i \mathcal{D}) / Z = \rho_{ij} = \frac{1}{Z} (\delta_{ij} + M_{ij}) \quad (31)$$

Pour des raisons de commodité ce sont les nombres Z et $\{M_{ij}\}$ que nous utiliserons comme paramètres variationnels plutôt que les quantités p et $\{R_{ij}\}$ auxquelles ils peuvent aisément être reliés.

a) Equation du mouvement pour la mesure de la valeur moyenne = TDHF

Considérons d'abord les équations associées à S_2 . Pour les dériver à partir de (9) il nous faut préalablement calculer $\text{Tr } \mathcal{A} \frac{d\tilde{\mathcal{D}}}{dt}$, $\text{Tr } \tilde{\mathcal{D}} \frac{d\mathcal{A}}{dt}$ et $\text{Tr } \mathcal{A} [H, \mathcal{D}]$. Ceci peut se faire au moyen du théorème de Wick et on obtient

$$\begin{aligned} \text{Tr } \mathcal{A} \frac{d\tilde{\mathcal{D}}}{dt} &= \frac{1}{4} \text{Tr } B \dot{M} \\ \text{Tr } \tilde{\mathcal{D}} \frac{d\mathcal{A}}{dt} &= \frac{1}{4} (\dot{a} + \text{Tr } \dot{B} (1+M)) \end{aligned} \quad (32)$$

Dans les équations (32) nous avons introduit la notation Tr pour indiquer une trace dans l'espace à un corps par opposition avec le symbole Tr pour trace dans l'espace de Fock. Si pour Hamiltonien \hat{H} nous adoptons

$$\hat{H} = \sum_{ij} T_{ij} a_i^\dagger a_j + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \tilde{V}_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \quad (33)$$

la quasi énergie s'écrit

$$\mathcal{E}_2 = -i \text{Tr } \mathcal{A} [H, \tilde{\mathcal{D}}] = -\frac{i}{4} \text{Tr } B [\mathcal{L}, M] \quad (34)$$

l'hamiltonien \mathcal{L} étant celui de Hartree-Fock

$$h_{ij} = T_{ij} + \frac{1}{2} \sum_{k \ell} \tilde{V}_{i k j \ell} (1+M)_{\ell k} \quad (35)$$

Afin de condenser les formules il est commode d'introduire la notation

$${}^{tr}V_{ij}^c = \sum_{k \ell} \tilde{V}_{i k j \ell} C_{k \ell} \quad (36)$$

de sorte que l'opérateur (matrice) h prend la forme

$$h = T + \frac{1}{2} {}^{tr}V^{(1+M)} \quad (37)$$

Nous pouvons maintenant effectuer les variations sachant que $\delta \alpha$ symbolise δa et $\{\delta b_j\}$. De même à $\delta \theta$ correspondent les variations δz et $\{\delta M_{ij}\}$. Les variations par rapport à a et z conduisent à deux identités $0=0$. Ceci est une conséquence des invariances de jauge (13) et (16) qui sont encore vérifiées dans les espaces variationnels restreints de α et θ définis par (28) et (29). Les autres variations conduisent au système d'équations matricielles

$$\dot{M} + i [h, M] = 0 \quad (38a)$$

$$\dot{B} + i [h, B] + i t = 0 \quad (38b)$$

avec l'apparition d'un nouveau champ moyen

$$t = \frac{1}{2} {}^{tr}V^{[B, M]} \quad (39)$$

Les équations (38) appellent quelques remarques. On doit en général s'attendre à obtenir des équations couplées pour le mouvement de α et θ (sauf bien sûr pour la variation la plus générale qui conduit aux équations exactes). Le sens d'un tel couplage est clair : quand on cherche à utiliser un espace variationnel restreint pour obtenir la description optimale d'une mesure, l'évolution temporelle du système se trouve influencée par l'observable qu'on mesure. En d'autres termes cette évolution cesse d'avoir un sens physique intrinsèque. Seule compte la quantité (le chiffre) qu'on optimise c'est à dire la valeur stationnaire de l'action $\langle A \rangle$ ou Δ .

La première équation du système (38) apparaît de ce point de vue remarquable. En effet on constate que l'évolution de M (donc de θ) qui est justement celle de TDHF est indépendante de l'évolution de B . On peut donc dire que TDHF représente l'évolution optimale pour la mesure de la valeur moyenne de toute observable à un corps à tout instant t_g . Quel est le sens de l'équation (38b)? Pour le discerner on peut considérer le cas particulier où la première équation est statique $[h, M] = 0$. On peut alors vérifier que l'équation (38b) est identique aux équations de la RPA autour du champ moyen h . Dans le cas général l'équation (38b) représente donc une équation RPA autour de la solution TDHF.

b) Equations du mouvement pour la dispersion

Pour utiliser les équations (23) il nous faut calculer $Tr \alpha \frac{d\tilde{\theta}}{dt}$, $Tr \tilde{\theta} \frac{d\alpha}{dt}$ et $Tr \alpha [H, \tilde{\theta}]$

. Utilisant à nouveau le théorème de Wick on obtient

$$\begin{aligned} Tr \alpha \frac{d\tilde{\theta}}{dt} &= -\frac{1}{2} {}^{tr}BMB\dot{M} \\ Tr \tilde{\theta} \frac{d\alpha}{dt} &= \frac{1}{2} {}^{tr}\dot{B}(B-MBM) \end{aligned} \quad (40)$$

$$\text{Tr } \tilde{\alpha}[\hat{H}, \tilde{\theta}] = -\frac{1}{2} \text{tr} ([L, B] + t)(B - MBM)$$

Afin de mettre sous forme plus compacte les équations provenant de la variation il est commode d'introduire les quantités X et Y mesurant la déviation par rapport aux équations (39)

$$\begin{aligned} X &= \dot{M} + i[L, M] \\ Y &= \dot{B} + i[L, B] + i t \end{aligned} \quad (41)$$

Les équations variationnelles s'écrivent alors

$$\begin{aligned} MBX + XB M &= i([A, M] - t + M t M) \\ BMY + YMB &= i([A, B] - \mu) \end{aligned} \quad (42)$$

avec deux nouveaux champs moyens de couplages

$$\begin{aligned} A &= \frac{1}{2} \text{tr} \int (B - MBM) \\ \mu &= \frac{1}{2} \text{tr} \int (BM)^2 - (M)^2 \end{aligned} \quad (43)$$

A un instant donné, connaissant B et M on calcule les champs s et u . On résoud alors les équations linéaires (43) pour trouver X et Y . Reportant les résultats obtenus dans les équations (42) on peut alors calculer l'évolution temporelle de B et M . Une fois le calcul terminé

$$\Delta = \text{Tr } c \tilde{t} \tilde{\theta} \Big|_{t_1} = \frac{1}{4} \text{tr } B^2 - (BM)^2 \quad (44)$$

5) CONCLUSION

Dans cette leçon, nous avons vu comment la notion de principe variationnel qui soutend une bonne part de la physique pouvait aussi être utilisée pour calculer le résultat d'une mesure quantique. Le principe adopté est structurellement identique à celui de Hamilton et fait jouer à la matrice densité du système et à l'observable mesurée les rôles de coordonnées conjuguées. La variation de l'action associée conduit à des équations du mouvement en général couplées. Le résultat de la mesure (valeur moyenne ou dispersion) est égal à l'action stationnaire. On obtient donc pour ce résultat une valeur optimisée compte tenu des espaces variationnels choisis. Finalement, dans le cas particulier d'observables à un corps et de matrices non corrélées, on dérive des équations généralisant TDHF mais dont la complexité apparaît cependant compatible avec les moyens de résolution actuellement disponibles.

REFERENCES

- 1) Voir par exemple P. Quentin, H. Flocard, Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. 28(1978) 523.
- 2) Voir par exemple A.L. Fetter, J.D. Walecka : "Quantum Theory of Many Particle Systems" McGraw Hill (1971) Chapter II.
- 3) Voir par exemple J.D. Bjorken, S.D. Drell : "Relativistic Quantum Field" McGraw Hill (1965) p. 17-22.
- 4) Pour l'essentiel le contenu de ce chapitre est extrait de l'excellent article de revue par K.T.R. Davies, K.R.S. Devi, S.E. Koonin et M. Strayer, Cal. Tech. preprint MAP 23(1982).
- 5) J. Blocki, H. Flocard, Phys. Lett. 85B(1979) 163.
- 6) N. Frascaria et al. Z. Phys. A294(1980) 167.
- 7) H. Flocard et M.S. Weiss, Phys. Lett. 105B(1981) 14.
- 8) R.P. Feynman et AR. Hibbs, Quantum mechanics and path integrals, McGraw Hill, N.Y., (1965). Une autre excellente revue est celle de S.E. Koonin dans Proceedings of the Nuclear Theory Workshop, Santa Barbara, G. Bertsch ed. (1981) 183, qui a inspiré pour une bonne part cette leçon II.
- 9) H. Goldstein, Classical Mechanics, Addison Wesley (1980)
- 10) G. Scher, M. Smith et M. Baranger, Ann. Phys. 130(1980) 290.
- 11) M. Creutz et B. Freedman, Brookhaven preprint BNL-28588, Août 1980.
- 12) W.H. Miller, J. Chem., Phys. 53(1970) 1949 et 53(1970) 3578.
- 13) T. Koeling et R.A. Malfliet, Phys. Rev. C22(1975) 181.
J. Knoll et R. Schaeffer, Ann. Phys. N.Y. 97(1976) 307.
- 14) S. Levit et V. Smilanski et D. Pelte, Phys. Lett. 53B(1974) 39.
H. Massmann et J.O. Rasmussen, Nucl. Phys. A243(1975) 155.
- 15) S. Levit et U. Smilanski, Nucl. Phys. A315(1979) 205.
- 16) S. Levit, J.W. Negele, Z. Paltiel, Phys. Rev. C21(1980) 1603.
- 17) D.M. Ceperley et M.H. Kalos, dans Monte-Carlo Methods in Statistical Physics K. Binder editeur, Springer Verla, N.Y. (1979) 145.
- 18) H. Kuratsuji et T. Suzuki, J. Math. Phys. 21(1980) 472.
- 19) J.P. Blaizot et H. Orland, Preprint Université Illinois (1981).
- 20) R.I. Stratonovitch, Doklady Akad Nauk USSR 115(1957) 1907.
- 21) J. Hubbard, Phys. Lett. 3(1959) 77.
- 22) T. Troudet, Thèse Phys. D.M.IT. (1982).
- 23) S. Levit, Phys. Rev. C 21(1980) 1594.
- 24) Y. Alhassid et S.E. Koonin, Phys. Rev. C23(1981) 1590.
- 25) K.R.S. Devi et S.E. Koonin, Phys. Rev. Lett. 47(1981) 27.
- 26) R. Balian et M. Vénéroni, Phys. Rev. Lett. 47 (1981) 1353.